

UNIVERSIDAD DE GRANADA

FACULTAD DE CIENCIAS



Departamento de Electrónica
y Tecnología de los Computadores

IMPLICACIONES DE LA NO PARABOLICIDAD Y LA
ANISOTROPÍA DE LA BANDA DE VALENCIA EN EL
COMPORTAMIENTO DE LOS HUECOS EN SEMICONDUCTORES
Y ESTRUCTURAS DE SEMICONDUCTORES

TESIS DOCTORAL

Francisco Manuel Gómez Campos

2006

D. Juan Enrique Carceller Beltrán, Catedrático de Electrónica del Departamento de Electrónica y Tecnología de los Computadores y **D. Salvador Rodríguez Bolívar**, Profesor Titular de Electrónica del Departamento de Electrónica y Tecnología de los Computadores,

CERTIFICAN

Que el trabajo de investigación que se recoge en la presente Memoria, titulada *Implicaciones de la no parabolicidad y la anisotropía de la banda de valencia en el comportamiento de los huecos en semiconductores y estructuras de semiconductores*, y presentada por **D. Francisco Manuel Gómez Campos** para optar al grado de Doctor por la Universidad de Granada, ha sido realizado en su totalidad bajo su dirección en el Departamento de Electrónica y Tecnología de los Computadores de la Universidad de Granada.

Granada, 7 de julio de 2006

Fdo. Juan Enrique Carceller Beltrán
Catedrático de Electrónica del Departamento de Electrónica y
Tecnología de los Computadores
Universidad de Granada

Fdo. Salvador Rodríguez Bolívar
Profesor Titular de Electrónica del Departamento de Electrónica
y Tecnología de los Computadores
Universidad de Granada

A Esther

A mis padres y hermanas

A mi abuela Natalia

Agradecimientos

Quisiera expresar mi agradecimiento a todas las personas que han hecho posible que esta tesis se haya hecho realidad:

A mis directores de tesis, D. Juan Enrique Carceller Beltrán y D. Salvador Rodríguez Bolívar, por su gran apoyo, tanto profesional como personal, y por todo el tiempo que han dedicado a la tarea de enseñarme a investigar. Por haberme animado en este trabajo, haber valorado mis aciertos y comprendido mis fracasos.

A D. Pedro Cartujo Estébanez, Catedrático de Electrónica y Director del Departamento de Electrónica y Tecnología de los Computadores de la Universidad de Granada durante la mayor parte del desarrollo de esta tesis doctoral, por su apoyo y por haberme facilitado los medios materiales que he necesitado en la realización de este trabajo.

A D. Francisco J. Gámiz Pérez, D. Luca Donetti y D. Noel Rodríguez Santiago, con los que he compartido mi lugar de trabajo durante estos años, por su agradable compañía y haberme hecho partícipe de sus vivencias.

Al resto de componentes del Grupo de Investigación en Dispositivos Electrónicos (GRIDE) del Departamento de Electrónica y Tecnología de los Computadores: D. Juan Antonio Jiménez Tejada, D. Juan Antonio López Villanueva, D. Andrés Godoy Medina, D. Miguel Ángel Carvajal Rodríguez, D. Francisco Jiménez Molinos, D. Carlos Sampedro Matarín, D. Alberto Palma López, D. Andrés M. Roldán Aranda, D. Juan Bautista Roldán Aranda, D. Pedro Cartujo Cassinello, D. Jesús Banqueri Ozaez, D. Ignacio Melchor Ferrer, D. Pablo Lara Bullejos, D. Manuel J. Espín Milla y D. Francisco García Ruíz con los que he compartido experiencias estos años y de los que he aprendido muchas cosas importantes.

De entre ellos, también mi agradecimiento a todos los que alguna vez fueron mis compañeros de viaje, porque con ellos la distancia fue más llevadera.

A D. Antonio García Ríos, D. Luís Parrilla Roure y D^a Encarnación Castillo Morales del Grupo de Investigación de Técnicas Digitales (DiTEC), por su generosa ayuda cuando la he necesitado.

A D. Rafael Godoy Rubio, del Departamento de Ingeniería de Comunicaciones de la Universidad de Málaga, y a D. Carlos Moreno de Jong van Coevorden, del Grupo de Electromagnetismo de la Universidad de Granada, por todos los momentos agradables que hemos pasado juntos.

A D. José Antonio Verdejo Cobos por su labor administrativa, mi gratitud por haberme hecho las cosas más fáciles.

A mi padre, porque con su ejemplo me enseñó a aprender por mí mismo. A mi madre y a mis hermanas, porque siempre me han apoyado. Al resto de mi familia, que siente como suya esta tesis.

Y muy especialmente a Esther, por todo lo que hemos vivido juntos y por todo lo que he descubierto estando a su lado.

A la cama no te irás sin aprender una cosa más (Refranero Español)

ÍNDICE

| | |
|---------------------------|---|
| Introducción | 1 |
|---------------------------|---|

Capítulo 1. Modelo de la Banda de Valencia

| | |
|--|----|
| 1.1 <i>Introducción</i> | 3 |
| 1.2 <i>Modelo de banda de valencia con anisotropía y no parabolicidad</i> | 5 |
| 1.3 <i>Parametrización de las funciones χ</i> | 14 |
| 1.4 <i>Resultados teóricos en equilibrio</i> | 23 |

Capítulo 2. Mecanismos de Scattering 3-D

| | |
|---|----|
| 2.1 <i>Introducción</i> | 29 |
| 2.2 <i>Scattering con fonones</i> | 33 |
| 2.2.1 <i>Fonones ópticos</i> | 35 |
| 2.2.2 <i>Fonones acústicos</i> | 41 |
| 2.3 <i>Scattering con impurezas ionizadas</i> | 47 |
| 2.4 <i>Implementación de las probabilidades de scattering en el simulador Monte Carlo</i> | 54 |
| 2.4.1 <i>Esquema de funcionamiento del simulador Monte Carlo</i> | 55 |
| 2.4.2 <i>Mejora en el algoritmo de determinación del estado final tras el scattering con impurezas ionizadas</i> | 58 |
| 2.5 <i>Comprobación de la validez de las probabilidades de scattering a campo cero</i> | 65 |
| 2.5.1 <i>Estudio de la población relativa de las bandas en equilibrio</i> ... | 67 |
| 2.5.2 <i>Estudio de las funciones de distribución en energías de las bandas en equilibrio</i> | 68 |
| 2.5.3 <i>Estudio de la energía media del gas de huecos</i> | 70 |
| 2.5.4 <i>Potenciales de deformación en equilibrio</i> | 75 |
| 2.5.5 <i>Conclusiones</i> | 78 |

| | | |
|--------------|--|----|
| 2.6 | <i>Resultados</i> | 78 |
| 2.6.1 | <i>Resultados obtenidos usando las funciones $\chi(\varepsilon)$ numéricas</i> | 79 |
| 2.6.2 | <i>Resultados obtenidos usando las funciones $\chi(\varepsilon)$ analíticas</i> | 86 |
| 2.6.3 | <i>Conclusiones</i> | 97 |

Capítulo 3. Relaciones Energía-Momento y Funciones Envolventes en Pozos

Cuánticos

| | | |
|--------------|---|-----|
| 3.1 | <i>Introducción</i> | 99 |
| 3.2 | <i>Ecuación de Schrödinger de masa efectiva para bandas isótropas y no parabólicas</i> | 102 |
| 3.3 | <i>Aproximación del potencial de pasos constantes</i> | 105 |
| 3.3.1 | <i>Solución en los pozos</i> | 106 |
| 3.3.2 | <i>Solución en las barreras</i> | 107 |
| 3.4 | <i>Condiciones de contorno</i> | 108 |
| 3.4.1 | <i>Corriente de densidad de probabilidad en los pozos</i> | 109 |
| 3.4.2 | <i>Corriente de densidad de probabilidad en las barreras</i> | 110 |
| 3.4.3 | <i>Conclusión</i> | 111 |
| 3.5 | <i>Cuantización de la energía en las bandas de valencia de Si y Ge</i> | 112 |
| 3.5.1 | <i>Cálculo de la energía paralela</i> | 112 |
| 3.5.2 | <i>Vector de onda en cada intervalo</i> | 113 |
| 3.5.3 | <i>Condiciones de contorno</i> | 114 |
| 3.5.4 | <i>Resultados</i> | 116 |
| 3.6 | <i>Funciones envolventes</i> | 121 |
| 3.7 | <i>Ecuación de Schrödinger de masa efectiva para bandas anisótropas y no parabólicas</i> | 127 |
| 3.8 | <i>Paralelismo entre las soluciones de la ecuación de Schrödinger de masa efectiva y las soluciones de otros métodos de cálculo</i> | 131 |

Capítulo 4. Densidad de Estados y Probabilidades de Scattering 2-D

| | | |
|--------------|---|-----|
| 4.1 | <i>Introducción</i> | 135 |
| 4.2 | <i>Densidad de estados 2-D</i> | 136 |
| 4.2.1 | <i>Relación entre densidades de estados 2D y 3D</i> | 139 |

| | | |
|-------|--|-----|
| 4.3 | <i>Un estudio sobre la selección de un conjunto adecuado de subbandas para la simulación</i> | 140 |
| 4.3.1 | <i>El modelo</i> | 143 |
| 4.3.2 | <i>Banda isótropa y no parabólica</i> | 145 |
| 4.3.3 | <i>Banda anisótropa y no parabólica</i> | 148 |
| 4.3.4 | <i>Conclusiones</i> | 151 |
| 4.4 | <i>Tasas de scattering bidimensionales. Scattering con fonones</i> | 152 |
| 4.4.1 | <i>Scattering con fonones ópticos</i> | 157 |
| 4.4.2 | <i>Scattering con fonones acústicos</i> | 160 |
| 4.4.3 | <i>Tasas de scattering bidimensionales. Scattering debido a la rugosidad superficial</i> | 170 |
| 4.4.4 | <i>Tasas de scattering debido a la rugosidad de puerta</i> | 179 |
| 4.4.5 | <i>Tasas de scattering debido a la rugosidad del óxido enterrado</i> | 180 |
| 4.5 | <i>Resultados</i> | 182 |
| 4.5.1 | <i>Efecto de la temperatura</i> | 188 |
| 4.5.2 | <i>Efecto del campo eléctrico aplicado</i> | 192 |
| 4.5.3 | <i>Efecto de la anchura de la lámina de Si</i> | 199 |
| 4.5.4 | <i>Efecto de la rugosidad de la interface Si-SiO₂</i> | 206 |
| 4.5.5 | <i>Efecto de la dirección de confinamiento</i> | 208 |
| | Conclusiones | 215 |
| | Apéndice A | 221 |
| | Apéndice B | 225 |
| | Bibliografía | 229 |

Nota sobre la nomenclatura:

En la actualidad el inglés es la lengua vehicular de la Ciencia y la Tecnología, es el idioma en el que se publican la gran mayoría de los resultados de investigación y con el que frecuentemente se comunican entre sí los miembros de la comunidad científica internacional. Por ello, cuando se emprende la escritura de un texto científico o técnico en lengua castellana como la presente memoria, el autor puede encontrar dificultades para traducir adecuadamente los conceptos. Por este motivo se suele optar por una castellanización de la palabra o tomar la palabra directamente del inglés.

Para evitar posibles confusiones del lector, en esta nota se indican los principales conceptos que se han mantenido con su denominación inglesa, y las traducciones que se han realizado:

- *Scattering*: se ha usado la palabra inglesa para designar el proceso por el cual el portador cambia su estado como consecuencia de una interacción breve con un agente externo. La probabilidad por unidad de tiempo de que acontezca una de estas interacciones ha sido traducida por “tasa de *scattering*”, equivalente a “*scattering rate*”.

- *Interface*: se ha usado la palabra inglesa para nombrar la superficie de separación entre dos materiales distintos.

- *Split-off*: se ha usado la palabra inglesa para la banda desplazada como consecuencia de la interacción espín-órbita en la banda de valencia.

- *Spline*: se ha usado la palabra inglesa para designar la técnica de ajuste usando polinomios a trozos.

Sirva también esta nota para pedir disculpas si esta decisión no es del agrado del lector.

Introducción

El conocimiento del comportamiento de los portadores en el seno de los semiconductores es una cuestión de gran interés desde el punto de vista de la ciencia y la tecnología. Por un lado, permite potenciar el desarrollo de los dispositivos electrónicos haciéndolos más eficientes y mejorando sus características al revelar las causas físicas que están relacionadas con los efectos indeseables en el dispositivo, dotando al investigador de recursos para ser capaz de proponer posibles alternativas que los eliminen. Por otra parte, permite explorar los caminos hacia nuevos tipos de dispositivos electrónicos, pudiéndose adquirir una visión del funcionamiento de los mismos antes de su fabricación. Por estas razones se dedican cada vez más esfuerzos a la investigación de los factores físicos que afectan a los portadores en los cristales y estructuras de semiconductores. Además, las técnicas computacionales actuales permiten considerarlos conjuntamente en la implementación de un simulador del transporte, y analizando los resultados que suministra el mismo es posible estimar los valores de determinadas magnitudes macroscópicas del sistema a partir de su descripción microscópica. Por ello, la simulación resulta muy útil tanto para comprobar modelos físicos como para obtener predicciones.

En este trabajo se lleva a cabo un estudio sobre el transporte de los huecos en cristales de Si y de Ge a partir del análisis de los resultados proporcionados por un simulador basado en el método Monte Carlo. Este simulador fue desarrollado con la intención de que fuese capaz de suministrar resultados precisos en cortos tiempos de cálculo. Para este fin se requiere utilizar un modelo de banda de valencia que tenga en cuenta sus características

esenciales, como son la anisotropía, la no parabolicidad y la degeneración, y que al mismo tiempo sea sencillo de manejar. Por ello esta investigación se centra inicialmente en la obtención de un modelo de banda de valencia de Si y de Ge que cumple estos requisitos, y se comprueba que los mismos proporcionan resultados teóricos similares a los de investigadores que usan modelos de banda de valencia más complejos. A continuación se evalúan las tasas de *scattering* con los fonones ópticos y acústicos, por ser éstos los mecanismos que influyen en mayor medida en la dinámica de los portadores en cristales puros, así como las correspondientes a las impurezas ionizadas, que son especialmente relevantes en cristales dopados, y se describe brevemente el esquema del simulador.

En este estudio se dedica una sección para mostrar los resultados de las simulaciones junto con los tiempos de cálculo necesarios para obtenerlos, llevándose a cabo asimismo una comparación con los datos experimentales y con los de otros autores que usan técnicas numéricas más complejas, y que por tanto requieren un mayor esfuerzo computacional.

Tras la investigación del transporte en cristales de Si y Ge, y después de haber observado que los modelos de banda de valencia presentados son adecuados, en este trabajo se aborda el estudio de la influencia de la no parabolicidad de la banda de valencia en las subbandas de energía y las funciones envolventes de los estados de los huecos en pozos cuánticos realizados con estos semiconductores con la idea de profundizar en el estudio del comportamiento de los dispositivos basados en la tecnología SOI (*Silicon on Insulator*), que pueden modelarse de esta forma. Con este mismo propósito se estima qué conjunto de subbandas de la estructura es el más adecuado para poder describir el transporte en este tipo de dispositivos, y por último se calculan las tasas de *scattering* de los huecos confinados con fonones ópticos y acústicos, así como las correspondientes a la rugosidad de las *interfaces* Si-O₂ de puerta y de óxido enterrado.

Por último, se exponen las conclusiones obtenidas en este trabajo.

Capítulo 1

Modelo de la Banda de Valencia

La más larga caminata comienza con un paso

(Proverbio hindú)

1.1 Introducción

El cálculo de la estructura de bandas de los sólidos en el contexto de la Física del Estado Sólido ha sido, y sigue siendo aún, el punto de partida de cualquier investigación que pretenda abordar el estudio del comportamiento de los portadores de carga en estos materiales y en estructuras diseñadas a partir de los mismos. Desde las primeras décadas del siglo veinte hasta nuestros días muchos investigadores han intentado llevar a cabo esta tarea usando diferentes procedimientos con distintos niveles de aproximación cada uno. Dentro del estudio de la estructura de bandas de los semiconductores, cabe destacar los que están basados en la Teoría de la Masa Efectiva [Luttinger, 1955a], en el Método del Pseudopotencial [Phillips, 1958] y en el Método de *Tight-Binding* [Slater, 1954] por su amplio uso por parte de la comunidad científica. En particular, el método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ es una técnica especialmente útil para calcular la estructura de la banda de valencia y que se referirá más adelante por ser el punto de partida del modelo de banda de valencia que se presenta en este estudio. Por lo común la aplicación de estas técnicas al cálculo de la estructura de bandas de un semiconductor no es una tarea sencilla, y las relaciones entre la

energía y el momento obtenidas son difíciles de manejar en un simulador de transporte, ya que se necesita almacenar una gran cantidad de información en matrices que tiene como resultado una ralentización del cálculo. Por este motivo, los autores que pretenden adentrarse en la simulación de los dispositivos recurren con frecuencia a simplificaciones y parametrizaciones de las estructuras de bandas [Pirovano, 2000] [Low, 2003].

El método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, como ya se ha indicado anteriormente, ha sido muy usado para el estudio de la estructura de la banda de valencia. Este método es capaz de describir la no parabolicidad y la anisotropía de la banda adecuadamente, además de poder incorporar los efectos del acoplamiento espín-órbita. Basándose en dicho método, Kane [Kane, 1957] obtuvo una ecuación cuyas soluciones son los valores de la energía de cada una de las tres bandas que componen la de valencia para un determinado valor del vector de onda. De esta forma, la relación entre la energía y el momento de la banda de valencia se escribe como

$$k^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} \gamma(\varepsilon, \hat{k}) \quad (1.1)$$

donde k es el módulo del vector de onda del hueco y \hat{k} es su vector unitario asociado, m_0 es la masa del electrón en reposo, \hbar es la constante de Planck normalizada, ε es la energía del hueco y γ es una función cuyos valores se obtienen resolviendo la ecuación de tercer grado

$$H_3 \gamma^3 + H_2 \gamma^2 + H_1 \gamma + H_0 = 0 \quad (1.2)$$

en la que

$$H_3 = [A + 2B] \times [A - B]^2 - 3C^2 [A - B] q(\theta, \phi) - 54 \left\{ \left[B^2 + \frac{C^2}{3} \right]^{3/2} + B \left[B^2 + \frac{C^2}{2} \right] \right\} p(\theta, \phi) \quad (1.3)$$

$$H_2 = [\Delta_{so} - 3\varepsilon] \times [-A^2 + B^2 + C^2 q(\theta, \phi)] \quad (1.4)$$

$$H_1 = A\varepsilon [3\varepsilon - 2\Delta_{so}] \quad (1.5)$$

$$H_0 = \varepsilon^2 [\varepsilon - \Delta_{so}] \quad (1.6)$$

siendo A , B y C tres constantes típicas del material, Δ_{so} la energía de *split-off*, y las funciones

$$q(\theta, \phi) = \sin^4 \theta \cos^2 \phi \sin^2 \phi + \cos^2 \theta \sin^2 \theta \quad (1.7)$$

$$p(\theta, \phi) = \sin^4 \theta \cos^2 \theta \cos^2 \phi \sin^2 \phi \quad (1.8)$$

donde θ y ϕ son los ángulos azimutal y polar en coordenadas esféricas.

La ecuación (1.2) tiene tres soluciones para la variable γ . Este hecho está íntimamente relacionado con la existencia de tres relaciones $\varepsilon(\vec{k})$ diferentes en la banda de valencia que se denominan bandas de huecos pesados, ligeros y *split-off*. Además, dicha ecuación da como resultado una banda anisótropa y no parabólica, por lo que su solución es complicada de parametrizar en función de la energía y la dirección con el fin de obtener un modelo analítico.

En este capítulo se mostrará el cálculo y parametrización de un modelo de banda de valencia derivado de la ecuación de Kane a partir del modelo de Dewey *et al.* [Dewey, 1993] que mejora las características de éste. Basándonos en este modelo se desarrollará todo el trabajo posterior de simulación de transporte.

1.2 Modelo de banda de valencia con anisotropía y no parabolicidad

En su trabajo de 1993, Dewey y Osman [Dewey, 1993] estudiaron el transporte de huecos en un cristal de Si con un campo eléctrico aplicado a partir de un modelo de banda de valencia en el que la idea fundamental consistía en separar la anisotropía y la no parabolicidad en dos funciones distintas. Para la anisotropía se utilizó la función que habitualmente se usa para describir la misma en la banda de valencia [Jacoboni, 1983], mientras que la no parabolicidad se parametrizó usando una función que denominaron $\beta(\varepsilon)$. Esta idea ya había sido propuesta por Ottaviani *et al.* [Ottaviani, 1975], aunque estos últimos autores propusieron usar un valor constante β para tener en cuenta la no parabolicidad de la banda en vez de una función de la energía. La función de no parabolicidad de Dewey y Osman fue calculada a partir de los valores de masa efectiva obtenidos por otros autores [Gagliani, 1975] [Madarasz, 1981] y parametrizada por medio del método de splines cuadráticos para las bandas de huecos pesados y ligeros. De esta forma, usaron en sus simulaciones la siguiente relación $\varepsilon(\vec{k})$

$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2 |A|}{2m_0} [1 \mp g(\theta, \phi)] \times [1 - \beta(\varepsilon)] \quad (1.9)$$

siendo

$$g(\theta, \phi) = \sqrt{\left(\frac{B}{A}\right)^2 + \left(\frac{C}{A}\right)^2 (\sin^4 \theta \cos^2 \phi \sin^2 \phi + \cos^2 \theta \sin^2 \phi)} \quad (1.10)$$

Los signos - y + se refieren a la banda de pesados y ligeros respectivamente. La parametrización de la función $\beta(\varepsilon)$ que propusieron los autores fue

$$1 - \beta(\varepsilon) = \begin{cases} 1 - 43\varepsilon + 1200\varepsilon^2 & 0 \leq \varepsilon < 0.015 \text{ eV} \\ 0.8006 - 14.3632\varepsilon + 177.3117\varepsilon^2 & 0.015 \leq \varepsilon < 0.040 \text{ eV} \\ 0.6434 - 4.3521\varepsilon + 25.2716\varepsilon^2 & 0.040 \leq \varepsilon < 0.100 \text{ eV} \\ 0.46087 & \varepsilon \geq 0.100 \text{ eV} \end{cases} \quad (1.11)$$

$$1 - \beta(\varepsilon) = \begin{cases} 1 - 14.419\varepsilon + 106.7\varepsilon^2 & 0 \leq \varepsilon < 0.050 \text{ eV} \\ 0.7946 - 6.295\varepsilon + 26.37\varepsilon^2 & 0.050 \leq \varepsilon < 0.100 \text{ eV} \\ 0.4286 & \varepsilon \geq 0.100 \text{ eV} \end{cases} \quad (1.12)$$

La ecuación (1.11) es para la banda de huecos pesados, mientras que la ecuación (1.12) es la correspondiente a la banda de los huecos ligeros. El aspecto más útil de esta parametrización de la no parabolicidad es la sencillez con la que se puede obtener a partir de ella la función analítica que relaciona la energía del portador con el módulo de su vector de onda, y por consiguiente el cálculo de la energía de un portador tras un vuelo libre se puede hacer directamente, sin necesidad de cálculos iterativos. Sin embargo, un estudio más profundo muestra que el modelo anterior presenta serias deficiencias que deben ser eliminadas para poder describir convenientemente la física del problema.

En primer lugar, la función $\beta(\varepsilon)$ es continua, como cabría esperar. Sin embargo, en el ajuste que hicieron los autores no consideraron necesario imponer que la derivada fuese continua. Este hecho da lugar a comportamientos anómalos en la densidad de estados de la banda. Para ilustrarlo, supongamos una relación $\varepsilon(\vec{k})$ isótropa que tenga la función de no parabolicidad anterior

$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} [1 - \beta(\varepsilon)] \quad (1.13)$$

El número de estados por unidad de volumen del cristal en el intervalo de módulo de vector de onda comprendido entre k y $k + dk$, $D(k)$, cumple la siguiente relación

$$D(k)dk = \frac{k^2}{\pi^2} dk \quad (1.14)$$

donde se ha tenido en cuenta la degeneración de espín. Operando con las ecuaciones (1.13) y (1.14), podemos calcular el número de estados por unidad de volumen del cristal en el intervalo de energías entre ε y $\varepsilon + d\varepsilon$

$$D(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{m_0^{3/2}}{\hbar^3} \sqrt{\varepsilon} \mathfrak{Z}(\varepsilon) d\varepsilon \quad (1.15)$$

siendo

$$\mathfrak{Z}(\varepsilon) = \frac{1}{[1 - \beta(\varepsilon)]^{3/2}} - \frac{\varepsilon}{[1 - \beta(\varepsilon)]^{5/2}} \frac{d[1 - \beta(\varepsilon)]}{d\varepsilon} \quad (1.16)$$

La diferencia que introduce la no parabolicidad en la densidad de estados es la función $\mathfrak{Z}(\varepsilon)$, que en el caso parabólico es la unidad. Esta función está relacionada con la derivada de $\beta(\varepsilon)$, y por consiguiente una discontinuidad en la derivada se manifestaría como una discontinuidad en la función $\mathfrak{Z}(\varepsilon)$ y en las magnitudes relacionadas con ella. En concreto, cuando se calculan tasas de *scattering* usando el modelo de Dewey y Osman se observan saltos en las curvas que no tienen sentido físico alguno. Por tanto, el modelo de Dewey y Osman es insuficiente para estudiar adecuadamente el transporte de huecos en Si, y es necesario investigar un modelo de banda que verifique la continuidad de la derivada en la función $\beta(\varepsilon)$ que se proponga.

Por ello nuestros primeros esfuerzos se encaminaron hacia el cálculo de una estructura de banda de valencia que proporcionase tasas de *scattering* continuas. Aprovechamos para ello la forma general de la relación $\varepsilon(\vec{k})$ de Dewey y Osman, y usamos la misma función que describe la anisotropía por haber sido usada teóricamente en muchos trabajos anteriores y contrastada experimentalmente para los huecos pesados y ligeros [Dresselhaus, 1955], [Luttinger, 1955b], [Lax, 1958], [Ottaviani, 1975], [Jacoboni, 1983], [Helmholz, 2002]. Incluimos además la banda de *split-off* en nuestro modelo, a la que le asignamos un carácter isótropo y no parabólico. Como resultado de todas estas consideraciones, obtuvimos la siguiente estructura de bandas

$$\varepsilon(\vec{k}) = \begin{cases} \frac{\hbar^2 k^2 |A|}{2m_0} [1 - g(\theta, \phi)] \chi_H(\varepsilon) & \varepsilon \geq 0 & ; \text{Huecos pesados} \\ \frac{\hbar^2 k^2 |A|}{2m_0} [1 + g(\theta, \phi)] \chi_L(\varepsilon) & \varepsilon \geq 0 & ; \text{Huecos ligeros} \\ \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{so}} \chi_S(\varepsilon) + \Delta_{so} & \varepsilon \geq \Delta_{so} & ; \text{Huecos split - off} \end{cases} \quad (1.17)$$

donde m_{so} es la masa efectiva de los huecos en el fondo de la banda de *split-off*. Con el propósito de simplificar la notación en el resto de este trabajo, en lo sucesivo denominaremos por $\chi_{H,L,S}(\varepsilon)$ a las nuevas funciones que describirán la no parabolicidad de cada banda, siendo equivalentes a las funciones $1-\beta(\varepsilon)$ de Dewey y Osman. Por tanto las funciones $\mathfrak{I}(\varepsilon)$ se redefinen de la siguiente manera

$$\mathfrak{I}(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{[\chi_{H,L}(\varepsilon)]^{3/2}} - \frac{\varepsilon}{[\chi_{H,L}(\varepsilon)]^{5/2}} \frac{d\chi_{H,L}(\varepsilon)}{d\varepsilon} & \varepsilon \geq 0 & ; \text{Huecos pesados y ligeros} \\ \frac{1}{[\chi_S(\varepsilon)]^{3/2}} - \frac{\varepsilon - \Delta_{so}}{[\chi_S(\varepsilon)]^{5/2}} \frac{d\chi_S(\varepsilon)}{d\varepsilon} & \varepsilon \geq \Delta_{so} & ; \text{Huecos split - off} \end{cases} \quad (1.18)$$

Por semejanza con la relación entre la energía y el momento en una partícula libre, en este trabajo se define la *masa efectiva* del portador en cada banda según las siguientes expresiones

$$m_H(\varepsilon, \theta, \phi) = \frac{m_0}{A[1 - g(\theta, \phi)] \chi_H(\varepsilon)} \quad (1.19)$$

$$m_L(\varepsilon, \theta, \phi) = \frac{m_0}{A[1 + g(\theta, \phi)] \chi_L(\varepsilon)} \quad (1.20)$$

$$m_S(\varepsilon) = \frac{m_{so}}{\chi_S(\varepsilon)} \quad (1.21)$$

siendo la masa efectiva una función de la energía y de la dirección.

Para calcular la función $\chi_H(\varepsilon)$ de la banda de huecos pesados resolvimos numéricamente la ecuación (1.2) en 5000 direcciones hasta una energía de 1 eV. De los tres valores de γ encontrados para cada vector de onda se tomaron los valores más bajos, que son los que pertenecen a la banda de huecos pesados. Seguidamente se dividieron los

resultados obtenidos en cada dirección por $\frac{\hbar^2 k^2 |A|}{2m_0} [1 - g(\theta, \phi)]$. Por último, para obtener una función $\chi_H(\varepsilon)$ totalmente independiente de la dirección, se efectuó un promedio angular en todo el ángulo sólido.

Un procedimiento paralelo se siguió para calcular $\chi_L(\varepsilon)$. De las tres soluciones obtenidas de la resolución de la ecuación (1.2) para cada vector de onda, el valor intermedio es el correspondiente a la banda de huecos ligeros. Dividiendo los datos por $\frac{\hbar^2 k^2 |A|}{2m_0} [1 + g(\theta, \phi)]$ y efectuando el promedio angular se encontró la función $\chi_L(\varepsilon)$ independiente de la dirección.

Las anteriores bandas tienen determinada la masa efectiva del hueco para $k=0$ a través de los valores de A , B y C . En trabajos anteriores se discute el valor de los mismos, y siempre se sitúan en torno a unos valores típicos, habiendo un cierto acuerdo entre los autores [Dresselhaus, 1955], [Ottaviani, 1975], [Jacoboni, 1983]. Sin embargo, los valores de m_{so} usados por los autores presenta grandes variaciones entre sí. Por este motivo, en la elaboración del modelo de banda de valencia calculamos un valor adecuado de m_{so} a partir de la ecuación de Kane, ecuación (1.2). El procedimiento fue el siguiente: usando los valores de energía más altos de las soluciones de la ecuación (1.2), que son los correspondientes a la banda de *split-off*, les restamos la energía de *split-off* e impusimos que en el fondo de la banda la función $\chi_S(\varepsilon)$ fuese la unidad, al igual que para las funciones $\chi_H(\varepsilon)$ y $\chi_L(\varepsilon)$. De esta manera, efectuando un promedio angular fuimos capaces de encontrar un valor para m_{so} que estaba en consonancia con el que proporcionaban algunos autores [Dresselhaus, 1955] [Yu, 2001]. Por último, la obtención de $\chi_S(\varepsilon)$ se hizo de manera similar a la de $\chi_H(\varepsilon)$ y $\chi_L(\varepsilon)$.

Dicho procedimiento de cálculo se llevó a cabo para obtener la estructura de bandas del Si y del Ge. Usamos para ello los datos de la Tabla 1.1.

| Magnitud | Si | Ge |
|--|-------|--------|
| A (adimensional)^a | -4.22 | -13.38 |
| B (adimensional)^a | -0.78 | -8.48 |
| C (adimensional)^a | 4.80 | 13.14 |
| Δ_{so} (meV) ^a | 44 | 295 |
| $\frac{m_{so}}{m_0}$ (adimensional) ^b | 0.237 | 0.075 |

Tabla 1.1: Constantes de las bandas de valencia de Si y Ge

^a[Jacoboni, 1983]

^b Este trabajo

Los resultados numéricos obtenidos se representan en la Figura 1.1 y Figura 1.2 [Rodríguez-Bolívar, 2005a]. Se han comparado las funciones de no parabolicidad calculadas en este trabajo con los resultados de la parametrización de Dewey y Osman para Si, observándose un comportamiento paralelo en las funciones de no parabolicidad de

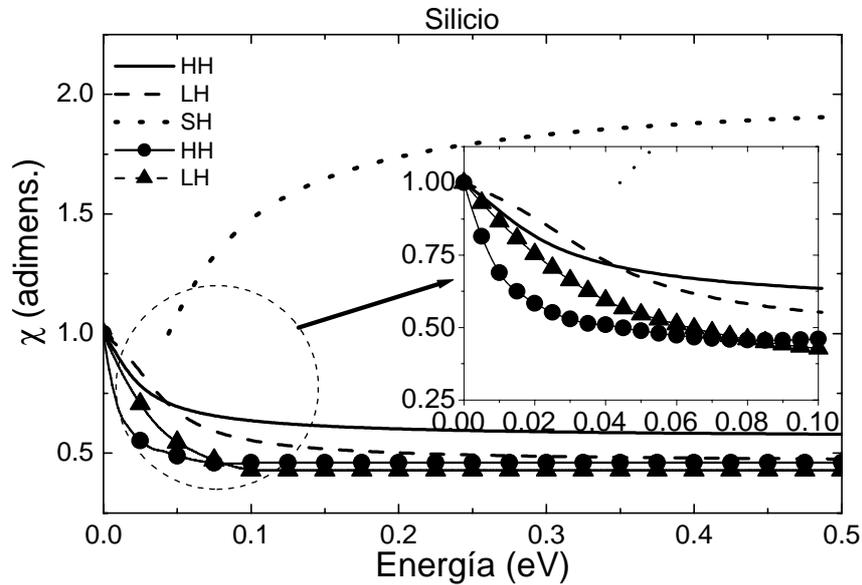


Figura 1.1: Funciones de no parabolicidad frente a la energía para Si (HH- huecos pesados, HL- huecos ligeros, HS- huecos *split-off*). Las curvas de líneas y símbolos son las funciones de no parabolicidad de Dewey y Osman. El detalle muestra las funciones a bajas energías, donde se dan las mayores variaciones.

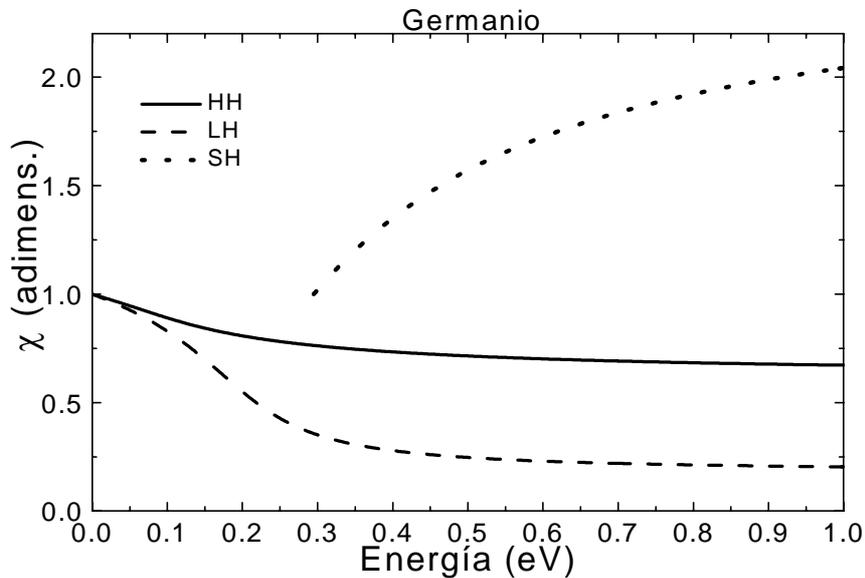


Figura 1.2: Funciones de no parabolicidad frente a la energía para Ge (HH- huecos pesados, LH- huecos ligeros, SH- huecos *split-off*)

huecos pesados y ligeros. Tales paralelismos se enumeran a continuación:

- Tanto los resultados de este trabajo como los de Dewey y Osman en Si muestran que las funciones de no parabolicidad de las bandas de huecos pesados y ligeros disminuyen su valor en torno al 30-50% hasta 100 meV, lo que implica que las masas efectivas de los portadores casi se dupliquen en tan corto intervalo de energías.

- La variación de las funciones de no parabolicidad es más fuerte a muy bajas energías, por lo que la no parabolicidad es un efecto que es necesario considerar incluso cuando los portadores se encuentren muy cerca del máximo de la banda de valencia.

- Se observa un cruce entre las funciones de los huecos pesados y ligeros en Si a una energía en torno a 70 meV según los cálculos de Dewey y Osman, y en torno a 40 meV según los cálculos de este trabajo.

En cambio, los resultados de Dewey y Osman muestran una no parabolicidad más acusada que la que se presenta en este trabajo.

Con respecto a la banda de *split-off* de Si nuestros cálculos indican que el comportamiento de la no parabolicidad en ella es el contrario al presentado por las de

pesados y ligeros, duplicándose cuando aumenta la energía, lo que conlleva una disminución de la masa efectiva de los huecos de *split-off* importante.

Con respecto al Ge, nuestros cálculos muestran tendencias similares a las observadas en Si, si bien es cierto que las variaciones de la no parabolicidad en torno a energías muy próximas al máximo de las bandas no son tan fuertes. No obstante, el caso de los huecos ligeros en Ge merece una mención especial, ya que a energías en torno a los 150-200 meV la función $\chi_L(\varepsilon)$ experimenta variaciones muy importantes que tienen gran repercusión en la estructura de bandas.

Por otro lado, un aspecto de gran interés a tener en cuenta es el comportamiento de las funciones $\mathfrak{I}(\varepsilon)$. Dichas funciones, definidas en la ecuación (1.18), están relacionadas con la derivada de las funciones de no parabolicidad χ . Calculamos numéricamente dichas funciones para el Si y el Ge y las representamos en la Figura 1.3 y Figura 1.4 junto con los resultados obtenidos usando el modelo para Si de Dewey y Osman que se mostraron en las ecuaciones (1.11) y (1.12).

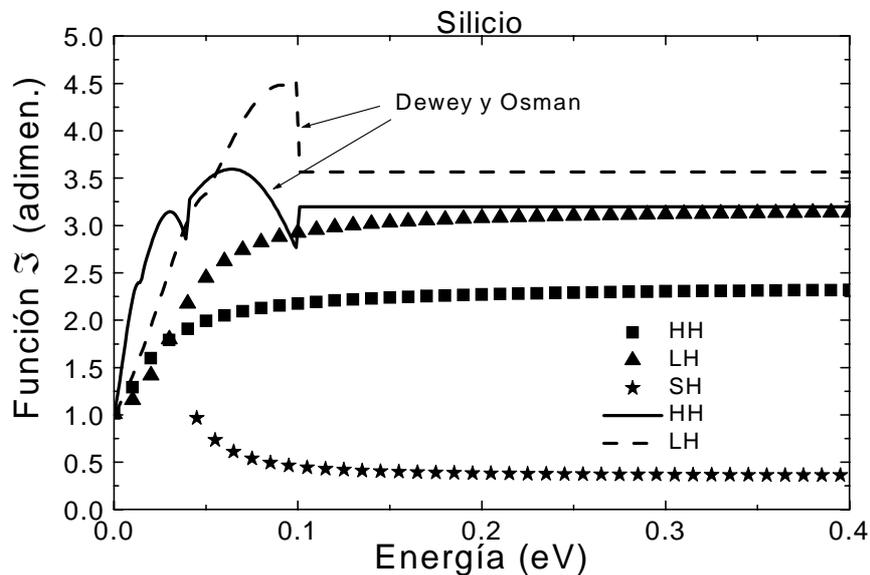


Figura 1.3: Funciones \mathfrak{I} frente a la energía para el Si. Las líneas son las funciones \mathfrak{I} evaluadas a partir de las funciones de no parabolicidad dadas por Dewey y Osman. Los símbolos son las funciones \mathfrak{I} calculadas en este trabajo. Las discontinuidades de las funciones \mathfrak{I} se manifiestan en las probabilidades de *scattering* como discontinuidades sin significado físico. Un modelo parabólico usaría $\mathfrak{I}=1$ para todas las bandas.

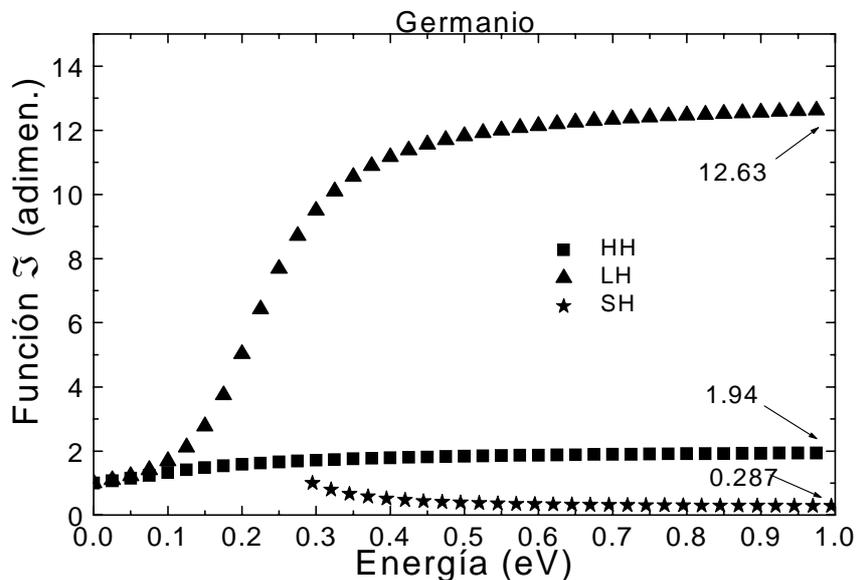


Figura 1.4: Funciones Ξ calculadas en este trabajo frente a la energía para el Ge. Un modelo parabólico usaría $\Xi=1$ para todas las bandas. Apréciase el fuerte cambio de la función Ξ de los huecos ligeros. Por claridad, se indican los valores de Ξ a la energía de 1 eV.

Como se observa en la Figura 1.3, la parametrización de Dewey y Osman no proporciona funciones $\Xi(\varepsilon)$ continuas como consecuencia de que los *splines* cuadráticos que emplearon no fueron generados de manera que la derivada fuese continua. En cambio, las funciones $\Xi(\varepsilon)$ calculadas numéricamente en este trabajo son continuas, como cabría esperar. Las funciones $\Xi(\varepsilon)$ calculadas para huecos pesados y ligeros, tanto en Si y Ge, tienen un comportamiento creciente, mientras que las funciones $\Xi(\varepsilon)$ para huecos *split-off* muestra un comportamiento decreciente. En ambos semiconductores, las variaciones de $\Xi(\varepsilon)$ son más fuertes en los huecos ligeros y *split-off*, mientras que para los huecos pesados la variación, aunque apreciable, es más suave. Merece la pena destacar la fuerte variación de la función $\Xi(\varepsilon)$ en los huecos ligeros del Ge, que se multiplica casi por 13 entre el máximo de la banda y 1 eV por debajo de dicho punto.

Habiendo quedado ya demostrada la importancia de la no parabolicidad de la banda de valencia de Si y Ge, el paso siguiente es obtener una parametrización adecuada de las

funciones $\chi(\varepsilon)$ obtenidas numéricamente que sea capaz de reproducir las funciones $\mathfrak{I}(\varepsilon)$ anteriores sin discontinuidades ni otros comportamientos anómalos.

1.3 Parametrización de las funciones χ

Después de lo expuesto en el apartado anterior, se hace patente que la forma más adecuada de parametrizar las funciones de no parabolicidad que se calcularon de forma numérica con el procedimiento descrito debería tener las siguientes características [Rodríguez-Bolívar, 2005b]:

- Conocido el vector de onda, sería deseable haber parametrizado las funciones de no parabolicidad de manera que la energía se pueda calcular fácilmente, como por ejemplo a través de una relación analítica. Ya que este tipo de cálculo se efectúa un gran número de veces a lo largo de una simulación, una relación analítica ahorraría tiempo y complejidad al simulador.

- Sería suficiente establecer un ajuste hasta 1 eV, ya que solamente se sobrepasaría este límite para campos eléctricos muy grandes, y bastaría para estudiar la mayoría de los casos prácticos.

- Sería necesario imponer la continuidad en la función de no parabolicidad y en su primera derivada para calcular la densidad de estados sin que aparezcan comportamientos anómalos como consecuencia de la parametrización.

De esta manera, se encontró que una parametrización adecuada de las funciones de no parabolicidad que tiene las características anteriores se puede obtener usando funciones a trozos del tipo [Rodríguez-Bolívar, 2005b]

$$f(\varepsilon) = \frac{a\varepsilon^2 + b\varepsilon + c}{d\varepsilon + 1} \quad (1.22)$$

Como se puede observar, dichas funciones contienen cuatro parámetros de ajuste en cada intervalo, frente a los tres de los *splines* cuadráticos. Esto facilita la tarea, ya que se puede imponer más condiciones para poder reproducir las funciones $\chi(\varepsilon)$ y $\mathfrak{I}(\varepsilon)$ convenientemente. Además, para este caso particular presentan una ventaja fundamental frente a los *splines* cúbicos, que tienen el mismo número de parámetros de ajuste, pero que

en cambio presentan problemas cuando se pretende calcular la energía para un determinado valor del vector de onda. Los *splines* cúbicos dan lugar a una ecuación de tercer grado, mientras que las funciones propuestas limitan el cálculo a una ecuación de segundo grado, por lo que se puede efectuar la resolución analítica de una manera sencilla, satisfaciéndose así la primera de las características que se buscaban.

Para obtener la mejor parametrización de las funciones de no parabolicidad, dividimos el rango de energías en cuatro intervalos: $[\varepsilon_0, \varepsilon_1]$, $[\varepsilon_1, \varepsilon_2]$, $[\varepsilon_2, \varepsilon_3]$ y $[\varepsilon_3, 1000 \text{ meV}]$. La energía ε_0 fue definida como la energía del máximo de la banda para los huecos pesados y ligeros, que por convenio se tomará igual a cero, mientras que su valor se fijó igual a la energía Δ_{so} para los huecos *split-off*. La excepción a esta regla fue la banda de huecos ligeros del Ge, que precisó de cinco intervalos para llevar a cabo el ajuste como consecuencia de la fuerte no parabolicidad de la misma (Figura 1.2 y Figura 1.4). Las funciones de ajuste en cada uno de los intervalos las denominaremos $A_1(\varepsilon)$, $A_2(\varepsilon)$, $A_3(\varepsilon)$ y $A_4(\varepsilon)$ respectivamente, y tienen la forma ya indicada en (1.22).

En primer lugar se estableció el valor de la energía ε_1 como aquel donde la concavidad de las funciones χ cambia. Las energías ε_2 y ε_3 se tomaron como parámetros para permitir un mejor ajuste. Se emplearon varios métodos para alcanzar las condiciones descritas, aunque merece la pena destacar sólo dos de ellos, que fueron capaces de dar buenos resultados:

- El primero de los procedimientos consistió en asignar los siguientes valores a las funciones $A_1(\varepsilon)$, $A_2(\varepsilon)$, $A_3(\varepsilon)$ y $A_4(\varepsilon)$ en los extremos de los intervalos: i) $A_1(\varepsilon_0) = \chi(\varepsilon_0)$, ii) $A_1(\varepsilon_1) = \chi(\varepsilon_1)$, iii) $A_2(\varepsilon_1) = \chi(\varepsilon_1)$, iv) $A_2(\varepsilon_2) = \chi(\varepsilon_2)$, v) $A_3(\varepsilon_2) = \chi(\varepsilon_2)$, vi) $A_3(\varepsilon_3) = \chi(\varepsilon_3)$, vii) $A_4(\varepsilon_3) = \chi(\varepsilon_3)$, viii) $A_4(1 \text{ eV}) = \chi(1 \text{ eV})$. Además, la derivada de $A_4(\varepsilon)$ en 1 eV se igualó a la derivada de χ a la misma energía, y por tanto ix) $A'_4(1 \text{ eV}) = \chi'(1 \text{ eV})$. Las ecuaciones vii), viii) y ix) se usaron para calcular los mejores a , b , c y d del cuarto intervalo. Una vez que la función $A_4(\varepsilon)$ se ha determinado, se calcula su derivada en ε_3 de forma analítica, y se impone que la función $A_3(\varepsilon)$ en ε_3 tenga la misma derivada que $A_4(\varepsilon)$ en el mismo punto. Incorporando además las

condiciones v) y vi) se estimaron los mejores valores de los parámetros para la función $A_3(\varepsilon)$. Repitiendo el mismo proceso se calcularon $A_2(\varepsilon)$ y $A_1(\varepsilon)$ sucesivamente. Por tanto, la idea fundamental en la que se basaba este método era imponer valores de las funciones de ajuste iguales a los valores de las funciones de no parabolicidad numéricas en los extremos de los intervalos, y una vez calculados los mejores ajustes, emplear las derivadas analíticas en los extremos de los intervalos para imponerlos en las funciones de los trozos siguientes.

Para el segundo método se impusieron las siguientes condiciones: i) $A_1(\varepsilon_0) = \chi(\varepsilon_0)$, ii) $A'_1(\varepsilon_1) = \chi'(\varepsilon_1)$, iii) $A'_2(\varepsilon_1) = \chi'(\varepsilon_1)$, iv) $A'_2(\varepsilon_2) = \chi'(\varepsilon_2)$, v) $A'_3(\varepsilon_2) = \chi'(\varepsilon_2)$, vi) $A'_3(\varepsilon_3) = \chi'(\varepsilon_3)$, vii) $A'_4(\varepsilon_3) = \chi'(\varepsilon_3)$, viii) $A_4(1\text{ eV}) = \chi(1\text{ eV})$ ix) $A'_4(1\text{ eV}) = \chi'(1\text{ eV})$. Las últimas tres ecuaciones se usaron para calcular los mejores parámetros para el cuarto intervalo. Utilizando el valor de la función $A_4(\varepsilon)$ en ε_3 e imponiéndolo como valor de $A_3(\varepsilon_3)$, junto con las demás condiciones para $A_3(\varepsilon)$ que se han indicado, se calcula la mejor aproximación a las funciones de no parabolicidad en el tercer intervalo, y así sucesivamente se estimaron las funciones $A_2(\varepsilon)$ y $A_1(\varepsilon)$. La idea fundamental en la que se basaba este método era imponer el valor numérico de la derivada de la función de no parabolicidad en los extremos de los intervalos. Una vez que se ha determinado la función analítica de mejor ajuste en el intervalo, se emplea su valor en los extremos para imponer la continuidad de la función de no parabolicidad con el intervalo contiguo.

Los dos métodos descritos son una buena forma de abordar el problema del ajuste de las funciones de no parabolicidad garantizando continuidad en la función y en su primera derivada. Sin embargo, hay que resaltar el hecho de que un buen ajuste de las funciones $\chi(\varepsilon)$ no garantiza que el comportamiento de las funciones $\mathfrak{I}(\varepsilon)$ sea el esperado. La principal motivación de nuestro trabajo está en que éstas últimas también se puedan estimar convenientemente con las expresiones analíticas obtenidas tras el ajuste para que la densidad de estados de la banda pueda ser calculada a partir de ellas sin introducir efectos espurios debidos al ajuste. Por eso se impuso como condición para aceptar un ajuste determinado que la diferencia entre las funciones $\mathfrak{I}(\varepsilon)$ calculadas a través de las expresiones analíticas y las calculadas a partir de los datos numéricos fuese suficientemente

pequeña. Por tanto, se eligió como indicador de la bondad del ajuste el máximo error relativo entre el valor de la aproximación analítica y los valores numéricos de la función $\mathfrak{I}(\varepsilon)$. Dicho indicador es muy sensible a los cambios en las funciones de ajuste, ya que es posible efectuar ajustes precisos de las funciones $\chi(\varepsilon)$ que, sin embargo, presenten importantes diferencias entre sus funciones $\mathfrak{I}(\varepsilon)$ y sus correspondientes numéricas debido a que éstas últimas contienen información sobre la derivada de $\chi(\varepsilon)$.

Usando los métodos descritos calculamos los parámetros de las funciones de ajuste de las funciones de no parabolicidad $\chi(\varepsilon)$ para las bandas de huecos pesados, ligeros y *split-off*. En la Tabla 1.2 se muestran los máximos errores relativos de las funciones $\mathfrak{I}(\varepsilon)$ que se obtuvieron para los mejores ajustes [Rodríguez-Bolívar, 2005b].

| Máximo Error Relativo (%) | | |
|--|------------------------------|------|
| $\left \frac{\mathfrak{I}_{\text{Analítico}}}{\mathfrak{I}_{\text{Numérico}}} \right \times 100$ | | |
| Si | Huecos pesados (HH) | 1.43 |
| | Huecos ligeros (LH) | 1.93 |
| | Huecos <i>split-off</i> (SH) | 0.52 |
| Ge | Huecos pesados (HH) | 0.20 |
| | Huecos ligeros (LH) | 2.29 |
| | Huecos <i>split-off</i> (SH) | 0.10 |

Tabla 1.2: Máximo error relativo entre las funciones \mathfrak{I} obtenidas con el ajuste analítico y las funciones \mathfrak{I} numéricas

Se puede observar que en el peor de los casos el máximo error relativo entre las funciones $\mathfrak{I}(\varepsilon)$ no superó el 2.30%. Por tanto, se puede afirmar que las funciones de ajuste son una buena aproximación para la descripción de la no parabolicidad de las bandas de valencia de Si y Ge. Los mejores valores del ajuste de los parámetros a , b , c y d se listan en el Apéndice A. Los ajustes de las funciones de la no parabolicidad se muestran en la Figura 1.5 y Figura 1.6 comparadas con los correspondientes datos numéricos. En ellas queda puesto de manifiesto el excelente acuerdo entre los datos numéricos y las curvas analíticas obtenidas tras el ajuste.

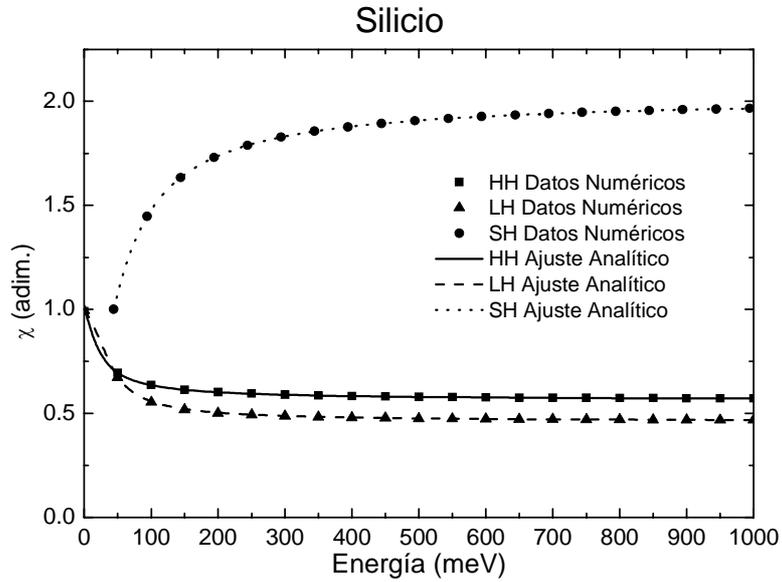


Figura 1.5: Funciones de no parabolicidad frente a la energía para Si (HH- huecos pesados, HL- huecos ligeros, HS- huecos *split-off*) y sus correspondientes ajustes calculados en este trabajo.

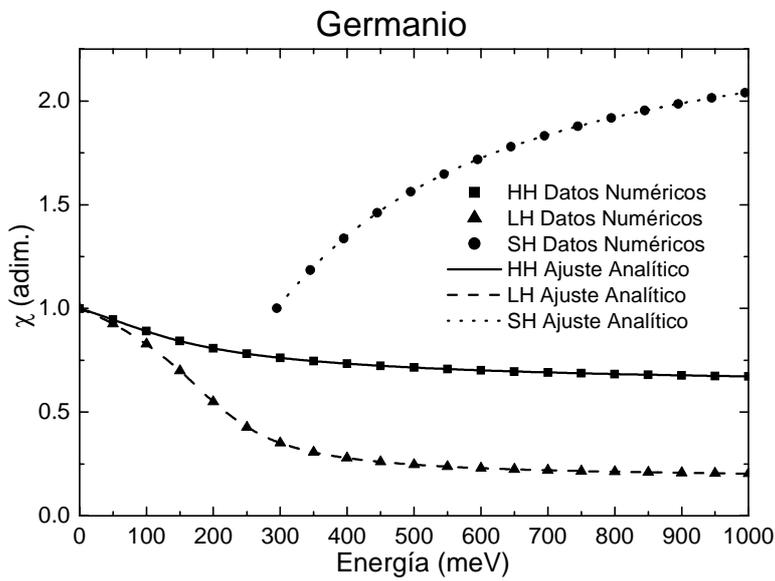


Figura 1.6: Funciones de no parabolicidad frente a la energía para Ge (HH- huecos pesados, HL- huecos ligeros, HS- huecos *split-off*) y sus correspondientes ajustes calculados en este trabajo.

Con la aproximación analítica que se ha propuesto es posible calcular magnitudes de interés de forma muy sencilla, como la relación $\varepsilon(\vec{k})$ de las bandas de valencia y la densidad de estados de las mismas. La relación $\varepsilon(\vec{k})$ se puede obtener a través de una ecuación de segundo grado en ε tal y como se comentó con anterioridad. Recordando la forma de las funciones de ajuste, ecuación (1.22), la relación $\varepsilon(\vec{k})$ de la banda de valencia se puede escribir

$$\begin{aligned} \varepsilon_{H,L}(k, \theta, \phi) = & \left\{ 1 - b \times f_{H,L}(\theta, \phi) \times k^2 \right. \\ & \left. - \sqrt{\left[1 - b \times f_{H,L}(\theta, \phi) \times k^2 \right]^2 - 4 \times c \times f_{H,L}(\theta, \phi) \times k^2 \left[a \times f_{H,L}(\theta, \phi) \times k^2 - d \right]} \right\} \\ & \times \left\{ 2 \times \left[a \times f_{H,L}(\theta, \phi) \times k^2 - d \right] \right\}^{-1} \end{aligned} \quad (1.23)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_S(k, \theta, \phi) = & \left\{ 1 - b \times f_S \times k^2 - d \times \Delta_{so} \right. \\ & \left. - \sqrt{\left[1 - b \times f_S \times k^2 - d \times \Delta_{so} \right]^2 - 4 \times \left[c \times f_S \times k^2 + \Delta_{so} \right] \left[a \times f_S \times k^2 - d \right]} \right\} \\ & \times \left\{ 2 \times \left[a \times f_S \times k^2 - d \right] \right\}^{-1} \end{aligned} \quad (1.24)$$

siendo los factores $f(\theta, \phi)$

$$f_H(\theta, \phi) = \frac{\hbar^2}{2m_0} |A| [1 - g(\theta, \phi)] \quad (1.25)$$

$$f_L(\theta, \phi) = \frac{\hbar^2}{2m_0} |A| [1 + g(\theta, \phi)] \quad (1.26)$$

$$f_S = \frac{\hbar^2}{2m_{so}} \quad (1.27)$$

Estos factores contienen la anisotropía de la banda. Sólo el factor f_S es independiente de la dirección por haberse considerado la banda de *split-off* isótropa en el modelo.

En la Figura 1.7 y Figura 1.8 se muestran los resultados del ajuste de la relación $\varepsilon(\vec{k})$ en la banda de valencia del Si y del Ge en las direcciones [100] y [111], comparándolos con los datos del modelo numérico de la banda. En estas figuras se observa también un excelente acuerdo entre ambos.

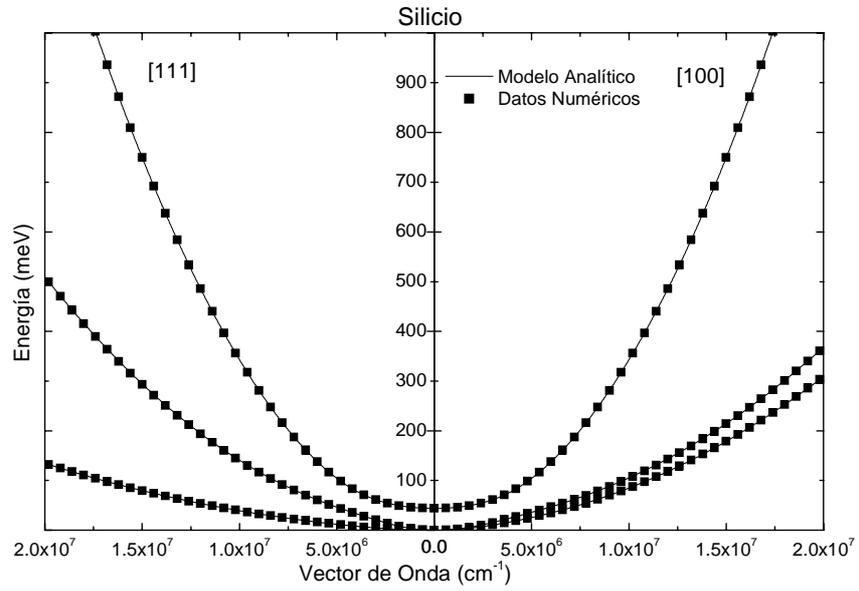


Figura 1.7: Relación $\varepsilon(\vec{k})$ de la banda de valencia de Si en las direcciones [100] y [111] calculada a partir del modelo analítico que se ha elaborado en este trabajo y comparación con el modelo numérico.

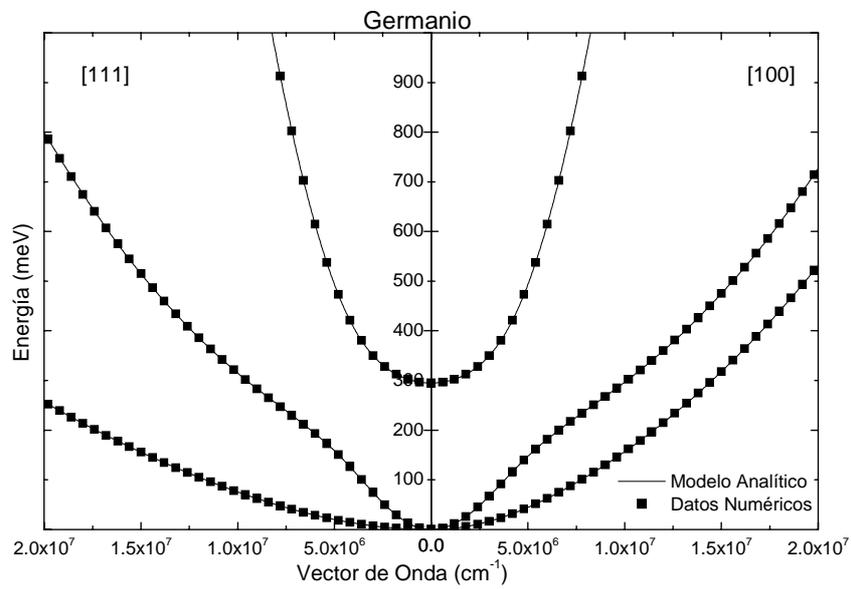


Figura 1.8: Relación de $\varepsilon(\vec{k})$ de la banda de valencia de Ge en las direcciones [100] y [111] calculada a partir del modelo analítico que se ha elaborado en este trabajo y comparación con el modelo numérico.

Con respecto al modelo de banda de valencia, el efecto de la anisotropía de los huecos pesados y ligeros en la estructura de bandas puede observarse en las mismas figuras cuando se representa la relación $\varepsilon(\vec{k})$ en dos direcciones distintas.

Por otro lado resulta de gran interés investigar la densidad de estados que proporciona este ajuste para la banda de valencia, ya que los de otros autores daban lugar a densidades de estados discontinuas [Dewey, 1993]. Usando el modelo de banda de valencia que se ha elaborado en este trabajo, la densidad de estados de cada una de las bandas de huecos se puede calcular con las ecuaciones

$$D_H(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left\{ \int_{\Omega} \frac{m_0^{3/2}}{|A|^{3/2} [1 - g(\theta, \phi)]^{3/2}} \frac{d\Omega}{4\pi} \right\} \sqrt{\varepsilon} \mathfrak{I}_H(\varepsilon); \quad \varepsilon \geq 0 \quad (1.28)$$

$$D_L(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left\{ \int_{\Omega} \frac{m_0^{3/2}}{|A|^{3/2} [1 + g(\theta, \phi)]^{3/2}} \frac{d\Omega}{4\pi} \right\} \sqrt{\varepsilon} \mathfrak{I}_L(\varepsilon); \quad \varepsilon \geq 0 \quad (1.29)$$

$$D_S(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_{so}}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon - \Delta_{so}} \mathfrak{I}_S(\varepsilon); \quad \varepsilon \geq \Delta_{so} \quad (1.30)$$

donde Ω es todo el ángulo sólido. Una de las ventajas de haber modelado las relaciones $\varepsilon(\vec{k})$ por funciones separadas de la energía y de la dirección es que la densidad de estados se puede calcular de manera muy sencilla haciendo uso de un promedio de la masa efectiva en el ángulo sólido, que son los términos entre llaves de las ecuaciones (1.28) y (1.29). Dichas integrales se pueden entender como un promedio de la función angular de masa efectiva elevada a 3/2. Por eso definiremos las magnitudes $\langle m_H^{3/2} \rangle$ y $\langle m_L^{3/2} \rangle$ como [Rodríguez-Bolívar, 2005a]

$$\langle m_H^{3/2} \rangle \equiv \int_{\Omega} \frac{m_0^{3/2}}{|A|^{3/2} [1 - g(\theta, \phi)]^{3/2}} \frac{d\Omega}{4\pi} \quad (1.31)$$

$$\langle m_L^{3/2} \rangle \equiv \int_{\Omega} \frac{m_0^{3/2}}{|A|^{3/2} [1 + g(\theta, \phi)]^{3/2}} \frac{d\Omega}{4\pi} \quad (1.32)$$

En la Figura 1.9 y Figura 1.10 se comparan las densidades de estados calculadas numéricamente con las evaluadas a través de la aproximación analítica. Se observa un acuerdo excelente entre ambas, que es una consecuencia de haber impuesto en el ajuste la

similitud entre las funciones $\mathfrak{I}(\varepsilon)$ numéricas y analíticas. Se ha incluido también en la Figura 1.9 las densidades de estados calculadas según el modelo de Dewey y Osman [Dewey, 1993] para los huecos pesados y ligeros en Si.

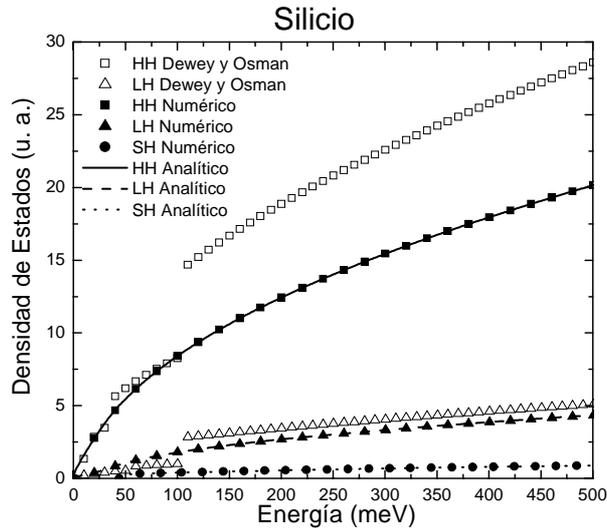


Figura 1.9: Densidad de estados en unidades arbitrarias calculada con los datos numéricos y con el modelo analítico para las bandas de huecos pesados, ligeros y *split-off* del Si. También se muestran las curvas de densidades de estados obtenidas a partir del modelo de Dewey y Osman para los huecos pesados y ligeros.

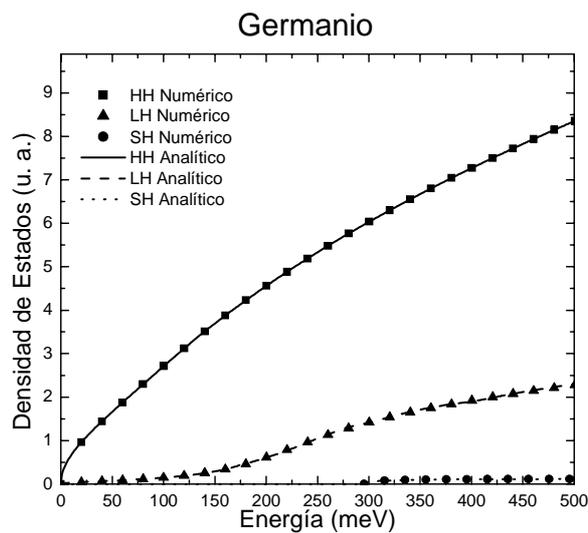


Figura 1.10: Densidad de estados en unidades arbitrarias calculada con los datos numéricos y con el modelo analítico para las bandas de huecos pesados, ligeros y *split-off* del Ge.

1.4 Resultados teóricos en equilibrio

Para comprobar si el modelo de banda de valencia que se ha presentado es una buena aproximación para iniciar un estudio sobre el transporte de huecos establecimos comparaciones de los valores de las magnitudes físicas en el equilibrio con resultados suministrados por métodos más complejos de cálculo.

Conocida la relación $\varepsilon(\vec{k})$, se puede calcular los valores en el equilibrio a través de integraciones. Con el modelo de banda desarrollado es posible evaluar las funciones de distribución del gas de huecos en equilibrio multiplicando las correspondientes densidades de estados, ecuaciones (1.28), (1.29) y (1.30), por la función de ocupación de las bandas. Usando la estadística de Fermi-Dirac para una temperatura T tales funciones de distribución serían

$$f_H(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2}{\hbar^2} \right)^{3/2} \langle m_H^{3/2} \rangle \frac{\sqrt{\varepsilon} \mathfrak{I}_H(\varepsilon)}{1 + e^{\frac{\varepsilon - \mu(T)}{k_B T}}}; \quad \varepsilon \geq 0 \quad (1.33)$$

$$f_L(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2}{\hbar^2} \right)^{3/2} \langle m_H^{3/2} \rangle \frac{\sqrt{\varepsilon} \mathfrak{I}_L(\varepsilon)}{1 + e^{\frac{\varepsilon - \mu(T)}{k_B T}}}; \quad \varepsilon \geq 0 \quad (1.34)$$

$$f_S(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_{so}}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{\sqrt{\varepsilon - \Delta_{so}} \mathfrak{I}_S(\varepsilon)}{1 + e^{\frac{\varepsilon - \mu(T)}{k_B T}}}; \quad \varepsilon \geq \Delta_{so} \quad (1.35)$$

siendo $\mu(T)$ el potencial químico, que es función de la temperatura [Sze, 1981]. Para la estadística de Maxwell-Boltzmann, que es una aproximación aceptable para semiconductores no degenerados, se tiene

$$f_H(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2}{\hbar^2} \right)^{3/2} \langle m_H^{3/2} \rangle \sqrt{\varepsilon} \mathfrak{I}_H(\varepsilon) e^{-\varepsilon/k_B T}; \quad \varepsilon \geq 0 \quad (1.36)$$

$$f_L(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2}{\hbar^2} \right)^{3/2} \langle m_H^{3/2} \rangle \sqrt{\varepsilon} \mathfrak{I}_L(\varepsilon) e^{-\varepsilon/k_B T}; \quad \varepsilon \geq 0 \quad (1.37)$$

$$f_S(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_{so}}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon - \Delta_{so}} \mathfrak{I}_S(\varepsilon) e^{-\varepsilon/k_B T}; \quad \varepsilon \geq \Delta_{so} \quad (1.38)$$

Un ejemplo de las magnitudes que pueden calcularse usando las anteriores funciones de distribución son las ocupaciones de cada una de las bandas, y de esta forma se podría estimar qué porcentaje de huecos se encuentran en forma de huecos pesados, ligeros o *split-off*. Se efectúa este cálculo a través de las ecuaciones siguientes

$$p_{H,L}(\mu(T), T) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2}{\hbar^2} \right)^{3/2} \langle m_{H,L}^{3/2} \rangle \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\varepsilon} \mathfrak{F}_{H,L}(\varepsilon)}{1 + \exp\left[\frac{\varepsilon - \mu(T)}{k_B T} \right]} d\varepsilon \quad (1.39)$$

$$p_S(\mu(T), T) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_{so}}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{\Delta_{so}}^{\infty} \frac{\sqrt{\varepsilon - \Delta_{so}} \mathfrak{F}_S(\varepsilon)}{1 + \exp\left[\frac{\varepsilon - \mu(T)}{k_B T} \right]} d\varepsilon \quad (1.40)$$

De estas igualdades se deducen directamente las poblaciones relativas

$$\% H(T) = \frac{100 \times p_H(\mu(T), T)}{p_H(\mu(T), T) + p_L(\mu(T), T) + p_S(\mu(T), T)} \quad (1.41)$$

$$\% L(T) = \frac{100 \times p_L(\mu(T), T)}{p_H(\mu(T), T) + p_L(\mu(T), T) + p_S(\mu(T), T)} \quad (1.42)$$

$$\% S(T) = \frac{100 \times p_S(\mu(T), T)}{p_H(\mu(T), T) + p_L(\mu(T), T) + p_S(\mu(T), T)} \quad (1.43)$$

Estos porcentajes se calcularon en cristales puros de Si y Ge. Los resultados obtenidos se representan en la Figura 1.11 y Figura 1.12.

En Si se observa que, del total de la población de huecos, los pesados representan alrededor del 85%, siendo los huecos ligeros cerca del 15%. Existe un máximo y mínimo de población para los huecos pesados y ligeros respectivamente en torno a 77 K. A partir de esta temperatura comienza a disminuir la importancia de los huecos pesados, frente a un ascenso en la población de ligeros y *split-off*. Estos últimos se encuentran en muy baja cantidad incluso a 450 K, donde representan alrededor del 2.5% del total. Sin embargo, los huecos de este tipo son susceptibles de alcanzar velocidades muy altas durante el arrastre del campo eléctrico debido a su baja masa efectiva, y su contribución a la movilidad puede ser relativamente importante.

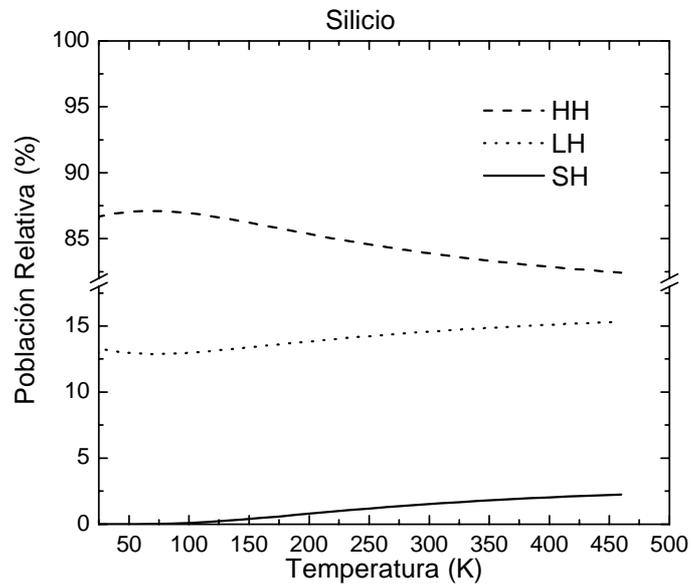


Figura 1.11: Población relativa de las bandas de huecos pesados (HH), ligeros (LH) y *split-off* (SH) en Si hasta 450 K.

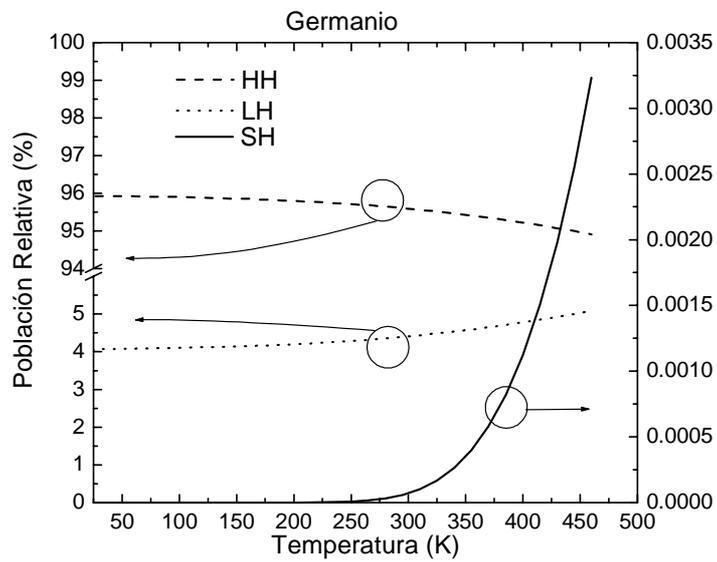


Figura 1.12: Población relativa de las bandas de huecos pesados (HH), ligeros (LH) y *split-off* (SH) en Ge hasta 450 K.

En Ge se encuentran mayores diferencias entre las poblaciones de huecos pesados y ligeros. Los primeros representan alrededor del 95.5% del total, mientras que los últimos sólo son entre un 4% y un 5%. Con respecto a los huecos *split-off*, la baja masa efectiva de los mismos junto con la gran diferencia de energías entre el máximo de la banda de valencia y el máximo de la banda de *split-off* (ver Tabla 1.1) dan como resultado una población relativa en esta banda excepcionalmente baja. En el mejor de los casos no llegan a representar el 0.0035% del total.

Por otro lado, es posible estimar la energía media en cada una de las bandas a través de las siguientes integraciones

$$\bar{\varepsilon}_{H,L}(\mu(T), T) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2}{\hbar^2} \right)^{3/2} \langle m_{H,L}^{3/2} \rangle \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2} \mathfrak{I}_{H,L}(\varepsilon)}{1 + \exp\left[\frac{\varepsilon - \mu(T)}{k_B T} \right]} d\varepsilon \quad (1.44)$$

$$\bar{\varepsilon}_S(\mu(T), T) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_{so}}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{\Delta_{so}}^\infty \frac{\varepsilon \sqrt{\varepsilon - \Delta_{so}} \mathfrak{I}_S(\varepsilon)}{1 + \exp\left[\frac{\varepsilon - \mu(T)}{k_B T} \right]} d\varepsilon \quad (1.45)$$

Para poder obtener la energía media total del gas de huecos se llevó a cabo una media ponderada, asignándole a cada valor de la energía media un peso proporcional a la población de la banda correspondiente. Se representan los datos en la Figura 1.13 junto con el valor de la energía media que se obtiene del principio de equipartición, $\bar{\varepsilon}(T) = \frac{3}{2} k_B T$. Se comprueba que uno de los efectos de la no parabolicidad es que no se verifique el principio de equipartición de la energía.

Por último, en la Tabla 1.3 comparamos nuestros resultados de energía media del gas de huecos con datos suministrados por otros autores [Nguyen, 2003] que investigaron el transporte de huecos por el método del pseudopotencial. Como se observa en la tabla, existe un buen acuerdo entre nuestros resultados y los que proporciona el método del pseudopotencial, tanto para el Si como para el Ge. Pensamos, por tanto, que el modelo de banda de valencia que se presenta en este trabajo puede ser una herramienta de gran utilidad para emprender una investigación sobre el transporte de los huecos en estos materiales semiconductores, teniendo como principal ventaja frente a otros métodos su

menor complejidad, lo que reduce apreciablemente los tiempos de cálculo cuando se implementa el simulador.

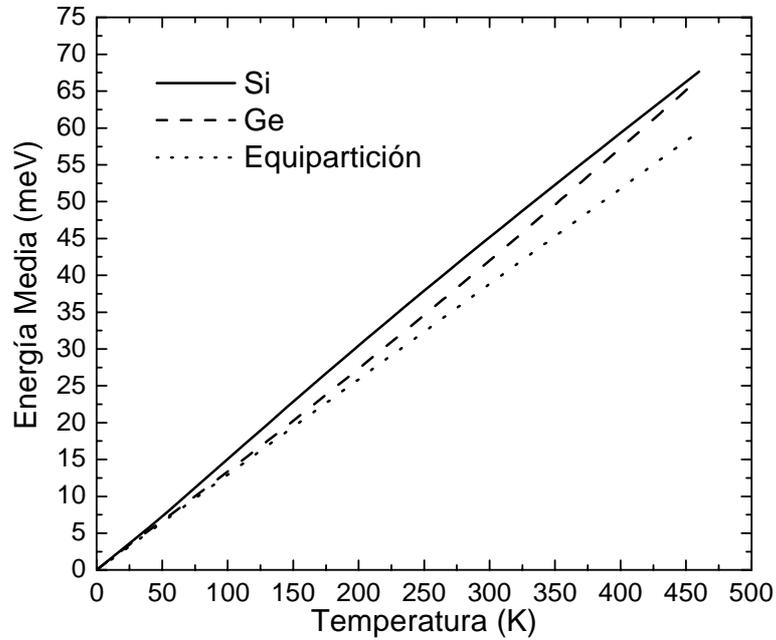


Figura 1.13: Energía media del gas de huecos en equilibrio en función de la temperatura para el Si y Ge. Se comparan los resultados obtenidos con los del principio de equipartición.

| | T(K) | Pseudopotencial (meV) | Este Trabajo (meV) | Equipartición (meV) |
|-----------|-------------|----------------------------------|-------------------------------|--------------------------------|
| Si | 77 | 12 | 11.45 | 9.96 |
| | 300 | 47 | 45.18 | 38.81 |
| Ge | 77 | 11 | 10.28 | 9.96 |
| | 300 | 42 | 42.02 | 38.81 |

Tabla 1.3: Energías medias del gas de huecos en Si y Ge a 77 K y 300 K. En la última columna se indican los valores de energía media dados por el principio de equipartición.

Capítulo 2

Mecanismos de *scattering* 3-D

Dame un pez y cenaré esta noche. Enséñame a pescar y cenaré siempre.

(Proverbio Chino)

2.1 Introducción

La simulación del transporte de portadores en semiconductores mediante el método Monte Carlo consiste principalmente en la evaluación de una secuencia de dos tipos de procesos: arrastres y *scatterings*. En los procesos de arrastre el estado del portador varía como consecuencia de la aplicación del campo eléctrico externo. La ley que rige dicho cambio se obtiene a partir de la aproximación semiclásica, y se expresa en la ecuación

$$\vec{F} = q\vec{E} = \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} \quad (2.1)$$

siendo \vec{F} la fuerza externa aplicada sobre el portador, que en el caso considerado será $q\vec{E}$, q la carga del portador y \vec{E} el campo eléctrico aplicado. Para un campo eléctrico constante y uniforme la variación en el tiempo del vector de onda \vec{k} es lineal (por tanto, continua), y se calcula con sencillez conociendo el valor inicial del vector de onda y el tiempo transcurrido desde el comienzo del arrastre.

Además de los cambios que en el estado del portador ejercen los procesos de arrastre, los mecanismos de *scattering* que estén presentes también afectan a la evolución del estado en el tiempo. Estos mecanismos de *scattering* son procesos de interacción con el portador que cambian bruscamente su estado en un tiempo muy corto. Tales procesos se denominan elásticos cuando se conserva la energía del portador, e inelásticos cuando el portador pierde o gana energía en el proceso de *scattering*. Las tasas de *scattering* se estiman a partir de la Regla de Oro de Fermi, obtenida a través de un tratamiento perturbativo de primer orden del problema de la interacción, y de la que se extrae también información fundamental para determinar el estado final del portador tras el mismo. La Regla de Oro de Fermi proporciona la probabilidad por unidad de tiempo, P , de que se experimente un *scattering* debido a un mecanismo en particular. En el caso de que dicho mecanismo sea de tipo inelástico, y por tanto que reste o añada una energía Δ al portador, la probabilidad por unidad de tiempo de sufrir un *scattering* se calcula a través de la expresión

$$P(\vec{k}, c; \vec{k}', c') = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \vec{k}', c' | H' | \vec{k}, c \rangle \right|^2 \delta(\varepsilon' - \varepsilon \mp \Delta) \quad (2.2)$$

siendo $|\vec{k}, c\rangle$ y $|\vec{k}', c'\rangle$ los estados inicial y final respectivamente del portador y del cristal, H' el hamiltoniano de la interacción, ε y ε' son las energías inicial y final del portador respectivamente, y la delta de Dirac expresa la conservación de la energía del sistema total formado por el cristal y el portador. De esta forma, el signo superior se emplea cuando el proceso es de ganancia de energía (absorción), mientras que se usa el signo inferior cuando el portador pierde energía (emisión). Cuando el mecanismo de *scattering* es elástico los cálculos son semejantes, con la diferencia de que Δ es cero.

El procedimiento de cálculo habitual consiste en trabajar con la transformada de Fourier del hamiltoniano de la interacción, $H'(q)$, de forma que desaparecen las coordenadas espaciales y son sustituidas por el vector de onda trasferido entre el agente del *scattering* y el portador [Jacoboni, 1983]. Las funciones de onda de los estados del sistema se pueden escribir como el producto de la función de onda del cristal, $|c\rangle$, y la función de onda del portador en el mismo, $|\vec{k}\rangle = N^{-1/2} u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, siendo N el número de celdas unidad en el

crystal, \vec{k} el vector de onda del portador y $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ la función de onda de Bloch normalizada en la celda unidad. De esta manera, el término $\langle \vec{k}', c' | H' | \vec{k}, c \rangle$ de la ecuación (2.2) es

$$\langle \vec{k}', c' | H' | \vec{k}, c \rangle = \frac{(2\pi)^{3/2}}{NV} \sum_q \langle c' | H'(\vec{q}) | c \rangle \int u_{\vec{k}'}^*(\vec{r}) e^{-i(\vec{k}' - \vec{k} - \vec{q}) \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.3)$$

En la anterior expresión podemos llevar a cabo el cambio de variable $\vec{r} = \vec{R} + \vec{r}'$, siendo \vec{R} un vector de la red directa y \vec{r}' un vector que variará en las dimensiones de la celda unidad. Con este cambio de variable, y aplicando la periodicidad de las funciones $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ en cada celda unidad (c.u.), se obtiene

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}', c' | H' | \vec{k}, c \rangle &= \frac{(2\pi)^{3/2}}{NV} \times \\ &\times \sum_q \langle c' | H'(\vec{q}) | c \rangle \left[\sum_{\vec{R}} e^{-i(\vec{k}' - \vec{k} - \vec{q}) \cdot \vec{R}} \right] \int_{\text{c.u.}} u_{\vec{k}'}^*(\vec{r}') e^{-i(\vec{k}' - \vec{k} - \vec{q}) \cdot \vec{r}'} u_{\vec{k}}(\vec{r}') d\vec{r}' \end{aligned} \quad (2.4)$$

La sumatoria en \vec{R} satisface la siguiente propiedad

$$\sum_{\vec{R}} e^{-i(\vec{k}' - \vec{k} - \vec{q}) \cdot \vec{R}} = \begin{cases} N & \text{si } \vec{k}' - \vec{k} - \vec{q} = \vec{G} \\ 0 & \text{si } \vec{k}' - \vec{k} - \vec{q} \neq \vec{G} \end{cases} \quad (2.5)$$

siendo \vec{G} un vector de la red recíproca. Éste será igual a cero para los procesos de *scattering* de tipo N (normales), y distinto de cero en los procesos de tipo U (umklapp). Esta relación se puede entender como la ley de conservación del cuasimomento del portador.

Reuniendo los anteriores resultados encontramos la probabilidad de *scattering* por unidad de tiempo con un cierto mecanismo [Jacoboni, 1983]

$$P(\vec{k}, c; \vec{k}', c') = \frac{(2\pi)^4}{\hbar V^2} \left| \sum_q \langle c' | H'(\vec{q}) | c \rangle \right|^2 G_{3D}(\mathcal{G}) \delta(\varepsilon' - \varepsilon \mp \Delta) \quad (2.6)$$

siendo V el volumen del cristal y $G_{3D}(\mathcal{G})$ una función relacionada con el solapamiento de las funciones de onda de Bloch:

$$G_{3D}(\mathcal{G}) = \left| \int_{\text{c.u.}} u_{\vec{k}'}^*(\vec{r}) e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) d\vec{r} \right|^2 \quad (2.7)$$

El argumento de la función G_{3D} es el ángulo de *scattering* \mathcal{G} , esto es, el ángulo formado por los vectores de onda inicial y final, que guarda la siguiente relación con las direcciones inicial (θ, ϕ) y final (θ', ϕ') del vector de onda

$$\cos \mathcal{G} = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\phi - \phi') \quad (2.8)$$

La función $G_{3D}(\mathcal{G})$ habitualmente se toma igual a la unidad para el estudio del *scattering* de electrones, mientras que para el caso de los huecos se usan las expresiones aproximadas para el *scattering* intrabanda e interbanda entre los diferentes tipos de huecos dadas por Wiley [Wiley, 1971]. Tales expresiones son

$$G_{3D, \text{intra}}(\mathcal{G}) = \frac{1}{4} [1 + 3 \cos^2 \mathcal{G}] \quad (2.9)$$

$$G_{3D, \text{inter}}(\mathcal{G}) = \frac{3}{4} \sin^2 \mathcal{G} \quad (2.10)$$

En el estudio de Wiley se obtienen estas funciones considerando las transiciones entre las bandas de huecos pesados y de ligeros. En nuestro trabajo también se usarán para las transiciones con huecos *split-off*.

Existen muchos factores que pueden romper la periodicidad de la red, como por ejemplo las vibraciones de la red (fonones), el resto de portadores [Matulionis, 1975], la existencia de impurezas, tanto en estado neutro [Erginsoy, 1950] como ionizadas, los defectos de la red [Bernholc, 1978], etc. Cada uno de estos factores puede ser considerado como un mecanismo de *scattering* en un simulador. Sin embargo, no todos ellos tienen la misma importancia en la dinámica de los portadores. En particular, los mecanismos de *scattering* de mayor interés en la simulación de cristales tridimensionales son el *scattering* con fonones, tanto de tipo óptico como acústico, y el *scattering* con impurezas ionizadas cuando el cristal se encuentra dopado en concentraciones apreciables. El resto de mecanismos de *scattering* de tipo tridimensional no serán considerados en este trabajo por no tener tanta trascendencia en la dinámica de los portadores.

El hecho de que los procesos de *scattering* sean tratados por medio de probabilidades hace que el método Monte Carlo sea una herramienta muy útil en este tipo de estudios, y por este motivo el simulador desarrollado en este trabajo se basó en esta técnica computacional.

2.2 *Scattering* con fonones

Los fonones son los modos de vibración de la red de átomos de un sólido en torno a sus posiciones de equilibrio como consecuencia de la energía térmica del cristal, y por tanto suponen una ruptura del potencial periódico de la red. Los cristales de Si y Ge tienen una base formada por dos átomos en las posiciones $(0, 0, 0)$ y $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$. Debido a que la interacción entre los átomos de la base será diferente a la interacción entre el resto de átomos de las celdillas adyacentes, el cristal tendrá dos tipos de fonones distintos en su seno, que denominamos fonones ópticos y acústicos. Por este motivo se hace necesario el estudio de la interacción de cada uno de estos tipos de fonón con el portador. En este trabajo no se considerará el *scattering* con fonones polares, puesto que éstos no existen en los semiconductores compuestos por un único elemento químico.

El cálculo de la relación entre la energía y el momento de los fonones de un cristal tridimensional, $\varepsilon_{ph}(\vec{q})$, es un trabajo complejo, y se necesita un conocimiento profundo de las simetrías del cristal para poder llevarlo a cabo. Sin embargo, es posible hacer una simplificación de estas relaciones para los fonones ópticos y acústicos con el propósito de estudiar el *scattering* con los portadores. Para los fonones acústicos se puede demostrar que su relación $\varepsilon_{ph}(\vec{q})$ es aproximadamente proporcional al vector de onda del fonón, q , para valores pequeños de éste, siendo la constante de proporcionalidad la velocidad del sonido en el material promediada en todas las direcciones, u , multiplicada por la constante de Planck. Por otro lado, los fonones ópticos tienen una energía que varía muy poco con el vector de onda del fonón, por lo que la relación $\varepsilon_{ph}(\vec{q})$ puede aproximarse por un valor constante, independiente del vector de onda del fonón. La ecuación siguiente resume las relaciones $\varepsilon_{ph}(\vec{q})$ de los fonones acústicos y ópticos que se van a usar en este trabajo.

$$\varepsilon_{ph}(\vec{q}) = \begin{cases} \varepsilon_{ph}(\vec{q}) \approx \hbar u |\vec{q}| & ; \text{fonones acústicos} \\ \varepsilon_{ph}(\vec{q}) \approx \hbar \omega_{op} = k_B \theta_{op} & ; \text{fonones ópticos} \end{cases} \quad (2.11)$$

En la Tabla 2.1 se muestran los valores usados en este trabajo para modelar las relaciones $\varepsilon(\vec{q})$ de los fonones en Si y Ge. La velocidad media del sonido, u , se obtuvo como el promedio $u = \frac{u_t + 2u_l}{3}$ [Jacoboni, 1983], siendo u_t la velocidad transversal y u_l la velocidad longitudinal del sonido en el medio.

| | Si | Ge | Unidades |
|--------------------|-------------------|-------------------|----------|
| u_l | 9.0×10^5 | 5.4×10^5 | cm/s |
| u_t | 5.3×10^5 | 3.2×10^5 | cm/s |
| u | 7.8×10^5 | 4.7×10^5 | cm/s |
| θ_{op} | 735 | 430 | K |
| $\hbar\omega_{op}$ | 63.4 | 37.1 | meV |

Tabla 2.1: Velocidad del sonido longitudinal (u_l), transversal (u_t) y promedio (u) en Si y Ge. Temperatura (θ_{op}) y energía ($\hbar\omega_{op}$) de los fonones ópticos en Si y Ge [Jacoboni, 1983]

Para comenzar la evaluación de las tasas de *scattering* por cualquier tipo de mecanismo es necesario plantear la forma de la perturbación que el mecanismo hace sobre el hamiltoniano periódico de la red. En el caso del *scattering* con fonones, la perturbación dependerá de la variación espacial del desplazamiento de los iones con respecto a su posición de equilibrio. Como punto de partida se toma la expresión del hamiltoniano dada por Kittel [Kittel, 1963]

$$H' = \tilde{\Xi} \frac{\partial \bar{y}}{\partial \vec{r}} \quad (2.12)$$

El factor de proporcionalidad entre el hamiltoniano de la interacción y las variaciones espaciales de la posición de los iones en el cristal alrededor de la posición de equilibrio es el tensor de deformación del cristal, $\tilde{\Xi}$.

El desplazamiento de los iones con respecto a su posición de equilibrio, \bar{y} , puede escribirse en términos de los operadores de creación a_q^\dagger y aniquilación a_q

$$\bar{y} = \sum_q \left[\frac{\hbar}{2\rho V \omega_q} \right]^{1/2} (a_q + a_{-q}^\dagger) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \xi \quad (2.13)$$

donde ρ es la densidad de masa del cristal, ω_q es la frecuencia del fonón con el que interacciona el portador y $\vec{\xi}$ es el vector unitario en la dirección de polarización del fonón. Introduciendo (2.13) en (2.12), y usando que

$$\begin{aligned} \left| \langle c' | a_q | c \rangle \right|^2 &= N_q \\ \left| \langle c' | a_{-q}^\dagger | c \rangle \right|^2 &= N_q + 1 \end{aligned} \quad (2.14)$$

siendo N_q el número medio de fonones en el cristal de momento $|\vec{q}|$ dado por la estadística de Bose-Einstein, que para una cierta temperatura T es

$$N_q = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_{ph}(q)}{k_B T}} - 1} \quad (2.15)$$

se tiene la siguiente probabilidad por unidad de tiempo de pasar de un estado \vec{k} a otro \vec{k}' mediante un *scattering* con fonones:

$$P(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\pi}{\rho V \omega_q} \left(\frac{N_q}{N_q + 1} \right) G_{3D}(\mathcal{G}) \left| \xi_i \Xi_{ij} q_j \right|^2 \delta(\varepsilon'(\vec{k}') - \varepsilon(\vec{k}) \mp \hbar \omega) \quad (2.16)$$

donde Ξ_{ij} es la componente ij del tensor de deformación, q_j es la componente j -ésima del vector de onda del fonón y ξ_i es la componente i -ésima de la dirección de polarización del fonón. La parte superior de la ecuación se usa para la absorción, mientras que la inferior se usa para la emisión de fonones.

En las siguientes secciones se elaborará la anterior ecuación para cada caso particular, efectuándose las aproximaciones convenientes.

2.2.1 Fonones ópticos

Los fonones ópticos son un tipo especial de modos de vibración de los átomos de la red cristalina en los que éstos se mueven en oposición de fase. Si bien es cierto que en principio se trata de oscilaciones de los átomos en torno a sus posiciones de equilibrio, y que por tanto deberían ser tratados con el formalismo expuesto en la sección anterior, el trabajo de Harrison [Harrison, 1956] muestra que, por las características particulares de este tipo de

fonones, el hamiltoniano de la perturbación debería ser proporcional al desplazamiento con respecto a la posición de equilibrio en vez de ser proporcional a la derivada de éste.

Según el trabajo de Harrison, el término $|\xi_i \Xi_{ij} q_j|^2$ de la ecuación (2.16) no dependería del vector de onda del fonón. En concreto, dicho término podría ser sustituido en primera aproximación por una constante [Jacoboni, 1983], que en este trabajo se simbolizará por D , denominada potencial de deformación óptico. Puesto que en este estudio se usa el modelo de relación $\varepsilon_{ph}(\vec{q})$ para los fonones ópticos de la ecuación (2.11), éstos tendrán siempre el mismo valor de energía $\hbar\omega_{op}$, independientemente de su vector de onda. Por tanto, la probabilidad por unidad de tiempo de *scattering* con fonones ópticos es

$$P^{opt}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\pi}{\rho V \omega_{op}} \left(\frac{N_{op}}{N_{op} + 1} \right) G_{3D}(\mathcal{G}) D^2 \delta(\varepsilon'(\vec{k}') - \varepsilon(\vec{k}) \mp \hbar\omega_{op}) \quad (2.17)$$

La probabilidad de *scattering* por unidad de tiempo para un hueco que se encuentre en un cierto estado \vec{k} se calcula considerando todas las posibles transiciones que se pueden dar desde dicho estado inicial al conjunto de estados finales disponibles que satisfacen las leyes de conservación de momento y energía. Por tanto, tal probabilidad de *scattering* por unidad de tiempo se calcula efectuando la integración

$$P(\vec{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int P(\vec{k}, \vec{k}') dV'_K \quad (2.18)$$

El factor $\frac{V}{(2\pi)^3}$ está relacionado con la densidad de estados en el cristal, ya que hay un estado final posible por cada volumen $\frac{(2\pi)^3}{V}$ del espacio K . Debido a que el espín es una magnitud que se conserva en las transiciones, se considera como estado final únicamente aquel que tenga idéntico espín que el inicial, por lo que no es necesario considerar el factor 2 de la degeneración del espín en el anterior término. La prima en el diferencial de volumen indica que la suma se efectúa sobre los estados finales. Usando coordenadas esféricas en el espacio K

$$dV'_K = k'^2 \sin \theta' d\theta' d\phi' dk' \quad (2.19)$$

y así

$$P^{opt}(\vec{k}) = \frac{\pi D^2}{(2\pi)^3 \rho \omega_{op}} \binom{N_{op}}{N_{op} + 1} \times \iiint G_{3D}(\mathcal{G}) \delta(\varepsilon'(\vec{k}') - \varepsilon(\vec{k}) \mp \hbar \omega_{op}) k'^2 \sin \theta' d\theta' d\phi' dk' \quad (2.20)$$

La anterior expresión combina características del estado inicial y final. De esta forma, las integrales tendrán distinta forma dependiendo del tipo de transición que tenga lugar, existiendo nueve alternativas posibles de transición entre las bandas de pesados (H), ligeros (L) y *split-off* (S), a saber, HH, HL, HS, LH, LL, LS, SH, SL, SS, indicando cada par de letras el estado inicial y el final. Para llevar a cabo la integración, resulta más útil transformar la ecuación (2.20) en una integral en energías, puesto que de esta forma la función delta de Dirac se puede tratar directamente.

$$P_{HH,LH,SH}^{opt}(\vec{k}) = \frac{\sqrt{2}\pi D^2}{(2\pi)^3 \hbar^3 \rho \omega_{op}} \binom{N_{op}}{N_{op} + 1} \times \iiint \sqrt{\varepsilon'} \mathfrak{S}_H(\varepsilon') m_H^{3/2}(\theta, \phi) G_{3D}(\mathcal{G}) \delta(\varepsilon'(\vec{k}') - \varepsilon(\vec{k}) \mp \hbar \omega_{op}) \sin \theta' d\theta' d\phi' d\varepsilon' \quad (2.21)$$

$$P_{HL,LL,SL}^{opt}(\vec{k}) = \frac{\sqrt{2}\pi D^2}{(2\pi)^3 \hbar^3 \rho \omega_{op}} \binom{N_{op}}{N_{op} + 1} \times \iiint \sqrt{\varepsilon'} \mathfrak{S}_L(\varepsilon') m_L^{3/2}(\theta, \phi) G_{3D}(\mathcal{G}) \delta(\varepsilon'(\vec{k}') - \varepsilon(\vec{k}) \mp \hbar \omega_{op}) \sin \theta' d\theta' d\phi' d\varepsilon' \quad (2.22)$$

$$P_{HS,LS,SS}^{opt}(\vec{k}) = \frac{\sqrt{2}\pi D^2 m_{so}^{3/2}}{(2\pi)^3 \hbar^3 \rho \omega_{op}} \binom{N_{op}}{N_{op} + 1} \times \iiint \sqrt{\varepsilon' - \Delta_{so}} \mathfrak{S}_S(\varepsilon') G_{3D}(\mathcal{G}) \delta(\varepsilon'(\vec{k}') - \varepsilon(\vec{k}) \mp \hbar \omega_{op}) \sin \theta' d\theta' d\phi' d\varepsilon' \quad (2.23)$$

donde por simplicidad se han definido las siguientes funciones angulares

$$m_H(\theta, \phi) \equiv \frac{m_0}{A[1 - g(\theta, \phi)]} \quad (2.24)$$

$$m_L(\theta, \phi) \equiv \frac{m_0}{A[1 + g(\theta, \phi)]} \quad (2.25)$$

que pueden entenderse como la dependencia de la masa efectiva en el extremo de las bandas de huecos pesados y ligeros con la dirección. Seguidamente se lleva a cabo la integración en las energías finales,

$$P_{HH,LH,SH}^{opt}(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2\pi}D^2}{(2\pi)^3 \hbar^3 \rho\omega_{op}} \binom{N_{op}}{N_{op}+1} \times \quad (2.26)$$

$$\sqrt{\varepsilon \pm \hbar\omega_{op}} \mathfrak{I}_H(\varepsilon \pm \hbar\omega_{op}) \iint m_H^{3/2}(\theta', \phi') G_{3D}(\mathcal{G}) \sin\theta' d\theta' d\phi'$$

$$P_{HL,LL,SL}^{opt}(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2\pi}D^2}{(2\pi)^3 \hbar^3 \rho\omega_{op}} \binom{N_{op}}{N_{op}+1} \times \quad (2.27)$$

$$\sqrt{\varepsilon \pm \hbar\omega_{op}} \mathfrak{I}_L(\varepsilon \pm \hbar\omega_{op}) \iint m_L^{3/2}(\theta', \phi') G_{3D}(\mathcal{G}) \sin\theta' d\theta' d\phi'$$

$$P_{HS,LS,SS}^{opt}(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2\pi}D^2 m_{so}^{3/2}}{(2\pi)^3 \hbar^3 \rho\omega_{op}} \binom{N_{op}}{N_{op}+1} \times \quad (2.28)$$

$$\sqrt{\varepsilon \pm \hbar\omega_{op} - \Delta_{so}} \mathfrak{I}_S(\varepsilon \pm \hbar\omega_{op}) \iint G_{3D}(\mathcal{G}) \sin\theta' d\theta' d\phi'$$

De las ecuaciones (2.26), (2.27) y (2.28) se puede obtener un resultado de gran importancia para implementar un simulador de Monte Carlo: cuando no se realiza la integración en los ángulos, las anteriores expresiones son funciones que dependen de la dirección. Tales funciones se interpretan como la probabilidad de que el vector de onda del estado final tenga una determinada orientación en el espacio. A partir de dichas ecuaciones, prescindiendo de los factores que no dependen de la dirección, se obtienen las siguientes funciones de probabilidad angular:

$$P_{HH,LH,SH}^{opt}(\theta, \phi, \theta', \phi') = m_H^{3/2}(\theta', \phi') G_{3D}(\mathcal{G}) \sin\theta' \quad (2.29)$$

$$P_{HL,LL,SL}^{opt}(\theta, \phi, \theta', \phi') = m_L^{3/2}(\theta', \phi') G_{3D}(\mathcal{G}) \sin\theta' \quad (2.30)$$

$$P_{HS,LS,SS}^{opt}(\theta, \phi, \theta', \phi') = G_{3D}(\mathcal{G}) \sin\theta' \quad (2.31)$$

que pueden ser implementadas con sencillez en un simulador Monte Carlo.

Cuando se pretende completar el cálculo de las ecuaciones (2.26), (2.27) y (2.28) hay que integrar una función complicada cuyo resultado dependerá de la dirección inicial del vector de onda. Aunque es posible trabajar con tasas de *scattering* dependientes de esta magnitud, resulta mucho más cómodo manejar tasas que dependan únicamente de la energía del portador, y por ello aproximaremos la función $G_{3D}(\mathcal{G})$ por su valor promedio en todo el ángulo sólido [Costato, 1973]. De esta manera, la integral se simplifica considerablemente y su dependencia de la dirección inicial del vector de onda se elimina. El promedio angular de la función $G_{3D}(\mathcal{G})$ toma el mismo valor tanto para *scattering* intrabanda como interbanda, ya que $\langle G_{3D,intra}(\mathcal{G}) \rangle = \langle G_{3D,inter}(\mathcal{G}) \rangle = 1/2$. Tras esta

aproximación, la tasa de *scattering* se puede expresar en función de la energía inicial del hueco:

$$P_{HH,LH,SH}^{opt}(\varepsilon) = \frac{D^2 \langle m_H^{3/2} \rangle}{2\sqrt{2\pi\hbar^3} \rho \omega_{op}} \binom{N_{op}}{N_{op}+1} \sqrt{\varepsilon \pm \hbar\omega_{op}} \mathfrak{S}_H(\varepsilon \pm \hbar\omega_{op}) \quad (2.32)$$

$$P_{HL,LL,SL}^{opt}(\varepsilon) = \frac{D^2 \langle m_L^{3/2} \rangle}{2\sqrt{2\pi\hbar^3} \rho \omega_{op}} \binom{N_{op}}{N_{op}+1} \sqrt{\varepsilon \pm \hbar\omega_{op}} \mathfrak{S}_L(\varepsilon \pm \hbar\omega_{op}) \quad (2.33)$$

$$P_{HS,LS,SS}^{opt}(\varepsilon) = \frac{D^2 m_{so}^{3/2}}{2\sqrt{2\pi\hbar^3} \rho \omega_{op}} \binom{N_{op}}{N_{op}+1} \sqrt{\varepsilon \pm \hbar\omega_{op} - \Delta_{so}} \mathfrak{S}_S(\varepsilon \pm \hbar\omega_{op}) \quad (2.34)$$

En anteriores trabajos [Rodríguez-Bolívar, 2005a] se usó un potencial de deformación que incluía el promedio angular de la función $G_{3D}(\mathcal{G})$. De esta forma, definiendo $D^{*2} = D^2 \langle G_{3D}(\mathcal{G}) \rangle$ se obtuvieron las tasas de *scattering* siguientes

$$P_{HH,LH,SH}^{opt}(\varepsilon) = \frac{D^{*2} \langle m_H^{3/2} \rangle}{\sqrt{2\pi\hbar^3} \rho \omega_{op}} \binom{N_{op}}{N_{op}+1} \sqrt{\varepsilon \pm \hbar\omega_{op}} \mathfrak{S}_H(\varepsilon \pm \hbar\omega_{op}) \quad (2.35)$$

$$P_{HL,LL,SL}^{opt}(\varepsilon) = \frac{D^{*2} \langle m_L^{3/2} \rangle}{\sqrt{2\pi\hbar^3} \rho \omega_{op}} \binom{N_{op}}{N_{op}+1} \sqrt{\varepsilon \pm \hbar\omega_{op}} \mathfrak{S}_L(\varepsilon \pm \hbar\omega_{op}) \quad (2.36)$$

$$P_{HS,LS,SS}^{opt}(\varepsilon) = \frac{D^{*2} m_{so}^{3/2}}{\sqrt{2\pi\hbar^3} \rho \omega_{op}} \binom{N_{op}}{N_{op}+1} \sqrt{\varepsilon \pm \hbar\omega_{op} - \Delta_{so}} \mathfrak{S}_S(\varepsilon \pm \hbar\omega_{op}) \quad (2.37)$$

Es importante destacar que en las anteriores expresiones las tasas de *scattering* correspondientes a los huecos *split-off* sólo están definidas para energías mayores que Δ_{so} .

| | Si | Ge | Unidades |
|-----------|----------------------|-----------------------|----------|
| D^* | 9.2×10^{10} | 1.02×10^{11} | eV/m |
| Ξ_0^* | 3.15 | 2.95 | eV |

Tabla 2.2: Potenciales de deformación en Si y Ge para *scattering* de huecos con fonones ópticos y acústicos.

En la tabla Tabla 2.2 se muestra el valor del potencial de deformación D^* que se han usado en este trabajo, obtenido a partir del ajuste de las curvas de velocidad de arrastre frente al campo eléctrico aplicado. La Figura 2.1 muestra las tasas totales de emisión y

absorción del *scattering* con fonones ópticos en función de la energía usando un modelo parabólico para una banda con la masa efectiva igual a la del fondo de la de la banda de valencia y usando el modelo de banda de valencia presentado en este trabajo. Estas tasas representadas son las que experimentan los huecos pesados o ligeros indistintamente, ya que las tasas totales de *scattering* con fonones ópticos, calculadas como la suma de todas las de *scattering* con fonones ópticos que afectan a un determinado tipo de hueco, son coincidentes para ambos, según se desprende de las ecuaciones (2.35), (2.36) y (2.37). Las mismas curvas son válidas para los huecos *split-off* a partir de la energía Δ_{so} .

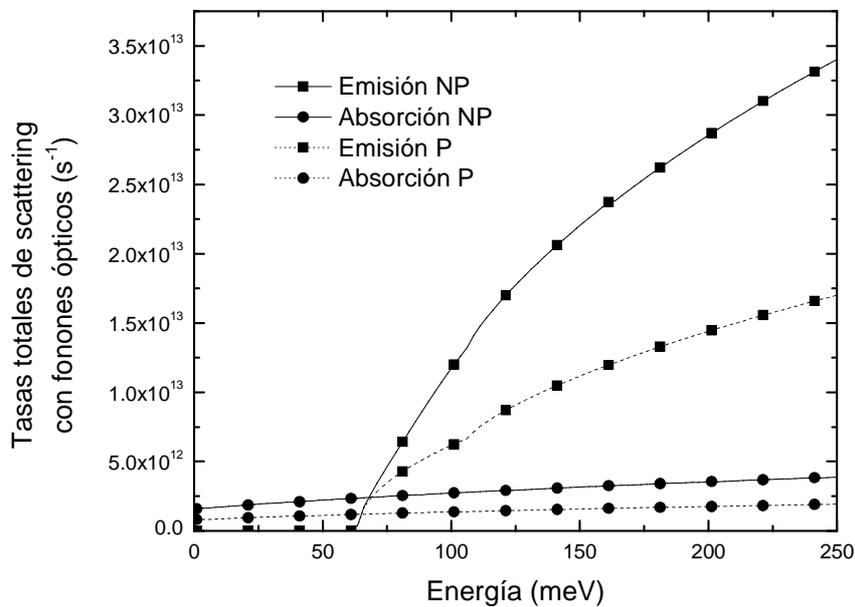


Figura 2.1: Tasas totales de emisión y absorción del *scattering* con fonones ópticos en Si a 300 K usando el modelo de banda de valencia que se ha presentado (NP) y un modelo de banda de valencia parabólico (P).

La figura muestra grandes diferencias entre las tasas de *scattering* de los modelos no parabólico y parabólico. Para el primero, tanto las tasas de emisión como las de absorción son mayores, debido principalmente al incremento en la densidad de estados del modelo no parabólico. De esta manera se resalta nuevamente que resulta fundamental la consideración de la no parabolicidad en las tasas de *scattering*, puesto que se puede deducir que la dinámica de los huecos será muy distinta según un modelo u otro, no solamente por la

inercia que éstos muestren a ser arrastrados por el campo, sino también por la distinta duración de los vuelos libres.

2.2.2 Fonones acústicos

Para obtener las expresiones equivalentes a las anteriores para los fonones acústicos es necesario repetir los mismos pasos anteriores pero considerando la relación $\varepsilon(\vec{q})$ correspondiente de la ecuación (2.11). Considerando un potencial de deformación isótropo para los fonones acústicos, Ξ_0 , se tiene

$$P(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\pi q \Xi_0^2}{\rho V u} \binom{N_q}{N_q + 1} G_{3D}(\mathcal{G}) \delta(\varepsilon'(\vec{k}') - \varepsilon(\vec{k}) \mp \hbar u q) \quad (2.38)$$

Llegados a este punto existen varias aproximaciones que suelen realizar los autores para efectuar la integración sobre los estados finales posibles tras la transición. Una de ellas es la aproximación llamada de equipartición [Costato, 1973]. Consiste en desprestigiar la energía del fonón acústico, haciendo que el *scattering* sea de tipo elástico en el sentido que se indicó al comienzo de este capítulo, y aproximar el número de fonones con momento $|\vec{q}|$ de la ecuación (2.15) por su desarrollo en serie de Taylor en torno a energía cero hasta primer orden. Además, dentro de esta aproximación se desprestigia la unidad frente a N_q , y por consiguiente no existirá diferencia entre las tasas de emisión y absorción.

Otra aproximación, denominada *de punto cero*, desprestigia la absorción de fonones, y únicamente considera la emisión [Costato, 1973]. Esta aproximación es más fuerte que la de equipartición, y por ello se usa en menor grado en la simulación de la dinámica de los portadores en dispositivos.

En la primera de las dos aproximaciones citadas el mecanismo de *scattering* por fonones acústicos es un proceso que simplemente aleatoriza la trayectoria de los portadores a lo largo de su vuelo dentro del semiconductor, sin restar ni añadir energía al mismo. Esta aproximación se usa con éxito sobre todo en la investigación del transporte de electrones en semiconductores y en estructuras hechas de semiconductores [Vasileska, 2003] [Fischetti, 1993]. En cambio, en la aproximación de punto cero, el campo eléctrico es el responsable

de añadir energía al portador, mientras que el mecanismo de *scattering* sería el encargado de restar la energía, de manera que se alcance el estado estacionario. Muy pocos autores de la bibliografía que se ha consultado durante el desarrollo de este trabajo usan esta última aproximación en el estudio del transporte de los portadores.

Sin embargo, algunos autores han mostrado la ineficacia de la aproximación de equipartición cuando se aborda el estudio del transporte de huecos [Fischer, 2000], ya que para estos portadores es necesario considerar el *scattering* con fonones acústicos como un mecanismo inelástico. Por ello, se ha pensado que la aproximación de Bufler *et al.* [Bufler, 2001] es la más adecuada para la realización de este trabajo, que consiste en calcular una energía media de los fonones acústicos que se ponen en juego en el *scattering* y realizar el desarrollo de las tasas de *scattering* de una manera paralela a como se hizo para los fonones ópticos. De esta manera el mecanismo de *scattering* se modela como inelástico, y por consiguiente la descripción del mismo es más próxima al comportamiento real. A partir de esta idea, hemos generalizado el procedimiento para incorporar la no parabolicidad de la banda de valencia [Rodríguez-Bolívar, 2005a].

Cálculo de la energía media de los fonones acústicos

Según el modelo de relación $\varepsilon(\vec{q})$ para los fonones acústicos que se mostró en la ecuación (2.11), el valor medio de la energía de los fonones acústicos que pueden intervenir en un *scattering* se puede calcular a partir del valor medio del módulo del vector de onda. Para calcular dicho valor medio en una cierta transición, primeramente se plantea la ecuación de conservación del momento, obteniéndose la igualdad

$$q = \sqrt{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \vartheta} \quad (2.39)$$

válida tanto para los procesos de absorción como de emisión. A continuación realizaremos dos aproximaciones para proseguir el cálculo: i) se despreciará la anisotropía de las bandas, usándose un valor medio de la masa efectiva y ii) se considerará que la energía del fonón acústico es suficientemente pequeña como para ser despreciada en ciertas etapas del desarrollo de este cálculo.

La primera aproximación permite obtener una masa efectiva independiente del ángulo a partir de los promedios $\langle m_H^{3/2} \rangle$ y $\langle m_L^{3/2} \rangle$ ya calculados de la siguiente forma

$$m_H = \langle m_H^{3/2} \rangle^{2/3} \quad (2.40)$$

$$m_L = \langle m_L^{3/2} \rangle^{2/3} \quad (2.41)$$

Con las aproximaciones i) e ii), la ecuación de conservación del momento se puede escribir de la siguiente forma general

$$q = k\sqrt{1 + s_{IF}(\varepsilon) - 2\sqrt{s_{IF}(\varepsilon)} \cos \vartheta} \quad (2.42)$$

Las funciones $s_{IF}(\varepsilon)$ dependen de la energía inicial del portador, y tienen expresiones distintas para cada transición entre bandas en función del tipo de hueco inicial I y el tipo final F :

$$\begin{aligned} s_{IF}(\varepsilon) &= 1 && ; \text{transiciones intrabanda} \\ s_{IF}(\varepsilon) &= \frac{m_{final} \chi_{inicial}(\varepsilon)}{m_{inicial} \chi_{final}(\varepsilon)} && ; \text{transiciones interbanda HL y LH} \\ s_{IF}(\varepsilon) &= \frac{m_{so} \chi_{inicial}(\varepsilon)}{m_{inicial} \chi_S(\varepsilon)} \left[1 - \frac{\Delta_{so}}{\varepsilon} \right] && ; \text{transiciones interbanda HS y LS} \\ s_{IF}(\varepsilon) &= \frac{m_{inicial} \chi_S(\varepsilon)}{m_{so} \chi_{inicial}(\varepsilon)} \left[1 - \frac{\Delta_{so}}{\varepsilon} \right]^{-1} && ; \text{transiciones interbanda SH y SL} \end{aligned} \quad (2.43)$$

A continuación se efectúa el promedio angular de la ecuación (2.42) en todo el ángulo sólido, y de esta forma se obtiene el valor medio del momento que se transfiere en un *scattering* entre la banda inicial I y la banda final F para un portador con energía inicial ε , $\bar{q}_{IF}(\varepsilon)$.

$$\bar{q}_{IF}(\varepsilon) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} q(\varepsilon, \vartheta) d\Omega = \frac{1}{2} \int_0^\pi k\sqrt{1 + s_{IF}(\varepsilon) - 2\sqrt{s_{IF}(\varepsilon)} \cos \vartheta} \sin \vartheta d\vartheta \quad (2.44)$$

Seguidamente se promedia dicho valor usando la distribución de energías de los portadores en equilibrio a temperatura T , obteniéndose

$$\langle q \rangle_{IF} = \frac{\int_{\varepsilon_{\min}}^{\infty} \bar{q}_{IF}(\varepsilon) e^{-\varepsilon/k_B T} D_I(\varepsilon) d\varepsilon}{\int_{\varepsilon_{\min}}^{\infty} e^{-\varepsilon/k_B T} D_I(\varepsilon) d\varepsilon} \quad (2.45)$$

siendo $D_I(\varepsilon)$ la función de densidad de estados iniciales de las ecuaciones (1.28), (1.29) y (1.30) y ε_{\min} la energía mínima en la que es posible la transición, que siempre será cero salvo cuando el estado inicial o final sea de tipo *split-off*, en cuyo caso $\varepsilon_{\min} = \Delta_{so}$. Para la ocupación de los portadores hemos empleado la estadística de Maxwell-Boltzmann por

motivos de simplicidad de cálculo. No obstante, se pueden obtener con sencillez las expresiones correspondientes con la estadística de Fermi-Dirac para su uso en aquellos estudios en los que se considere más adecuada.

Finalmente, de acuerdo con la ecuación (2.11), la energía media de los fonones acústicos para una cierta transición entre una banda inicial I y una banda final F es

$$\langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IF} = \hbar u \langle q \rangle_{IF} \quad (2.46)$$

Por consiguiente, el *scattering* con fonones acústicos se modelará a continuación siguiendo el paralelismo con los fonones ópticos, siendo la diferencia fundamental entre ambos el que la energía del fonón acústico será función de la temperatura, como consecuencia de la ecuación (2.45).

Tasas de scattering

Introduciendo los resultados anteriores en la ecuación (2.38) para el *scattering* con fonones acústicos desde una banda inicial I a una banda final F se tiene que

$$P_{IF}^{acu}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\pi \langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IF} \Xi_0^2}{\rho V \hbar u^2} \left(\frac{N_{\langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IF}}}{N_{\langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IF}} + 1} \right) G_{3D}(\mathcal{G}) \delta(\varepsilon'(\vec{k}') - \varepsilon(\vec{k}) \mp \langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IF}) \quad (2.47)$$

siendo

$$N_{\langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IF}} = \frac{1}{e^{\frac{\langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IF}}{k_B T}} - 1} \quad (2.48)$$

Efectuando la integración de la ecuación (2.47) en el espacio K de igual manera a como se hizo para el *scattering* con fonones ópticos se encuentra la siguiente integral

$$P_{IF}^{acu}(\vec{k}) = \frac{\pi \langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IF} \Xi_0^2}{(2\pi)^3 \hbar \rho u^2} \left(\frac{N_{\langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IF}}}{N_{\langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IF}} + 1} \right) \times \iiint G_{3D}(\mathcal{G}) \delta(\varepsilon'(\vec{k}') - \varepsilon(\vec{k}) \mp \langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IF}) k'^2 \sin \theta' d\theta' d\phi' dk' \quad (2.49)$$

Esta ecuación es similar a la ecuación (2.20), con la única diferencia de los valores de las constantes multiplicativas. Por tanto, siguiendo el mismo procedimiento que allí, las tasas de *scattering* con fonones acústicos son un conjunto de ecuaciones semejante a las ecuaciones (2.21), (2.22) y (2.23).

$$P_{HH,LH,SH}^{acu}(\vec{k}) = \frac{\sqrt{2\pi}\langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IH}\Xi_0^2}{(2\pi)^3\hbar^4\rho u^2} \left(\frac{N_{\langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IH}}}{N_{\langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IH}}+1} \right) \times \quad (2.50)$$

$$\iiint \sqrt{\varepsilon'} \mathfrak{S}_H(\varepsilon') m_H^{3/2}(\theta', \phi') G_{3D}(\mathcal{G}) \delta(\varepsilon'(\vec{k}') - \varepsilon(\vec{k}) \mp \langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IH}) \sin\theta' d\theta' d\phi' d\varepsilon'$$

$$P_{HL,LL,SL}^{acu}(\vec{k}) = \frac{\sqrt{2\pi}\langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IL}\Xi_0^2}{(2\pi)^3\hbar^4\rho u^2} \left(\frac{N_{\langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IL}}}{N_{\langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IL}}+1} \right) \times \quad (2.51)$$

$$\iiint \sqrt{\varepsilon'} \mathfrak{S}_L(\varepsilon') m_L^{3/2}(\theta', \phi') G_{3D}(\mathcal{G}) \delta(\varepsilon'(\vec{k}') - \varepsilon(\vec{k}) \mp \langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IL}) \sin\theta' d\theta' d\phi' d\varepsilon'$$

$$P_{HS,LS,SS}^{acu}(\vec{k}) = \frac{\sqrt{2\pi}\langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IS}\Xi_0^2 m_{so}^{3/2}}{(2\pi)^3\hbar^4\rho u^2} \left(\frac{N_{\langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IS}}}{N_{\langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IS}}+1} \right) \times \quad (2.52)$$

$$\iiint \sqrt{\varepsilon' - \Delta_{so}} \mathfrak{S}_S(\varepsilon') G_{3D}(\mathcal{G}) \delta(\varepsilon'(\vec{k}') - \varepsilon(\vec{k}) \mp \langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IS}) \sin\theta' d\theta' d\phi' d\varepsilon'$$

Se efectúa a continuación la integración en las energías finales, obteniéndose

$$P_{HH,LH,SH}^{acu}(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2\pi}\langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IH}\Xi_0^2}{(2\pi)^3\hbar^4\rho u^2} \left(\frac{N_{\langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IH}}}{N_{\langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IH}}+1} \right) \times \quad (2.53)$$

$$\sqrt{\varepsilon \pm \langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IH}} \mathfrak{S}_H(\varepsilon \pm \langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IH}) \iint m_H^{3/2}(\theta', \phi') G_{3D}(\mathcal{G}) \sin\theta' d\theta' d\phi'$$

$$P_{HL,LL,SL}^{acu}(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2\pi}\langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IL}\Xi_0^2}{(2\pi)^3\hbar^4\rho u^2} \left(\frac{N_{\langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IL}}}{N_{\langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IL}}+1} \right) \times \quad (2.54)$$

$$\sqrt{\varepsilon \pm \langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IL}} \mathfrak{S}_L(\varepsilon \pm \langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IL}) \iint m_L^{3/2}(\theta', \phi') G_{3D}(\mathcal{G}) \sin\theta' d\theta' d\phi'$$

$$P_{HS,LS,SS}^{acu}(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2\pi}\langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IS}\Xi_0^2 m_{so}^{3/2}}{(2\pi)^3\hbar^4\rho u^2} \left(\frac{N_{\langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IS}}}{N_{\langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IS}}+1} \right) \times \quad (2.55)$$

$$\sqrt{\varepsilon \pm \langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IS} - \Delta_{so}} \mathfrak{S}_S(\varepsilon \pm \langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IS}) \iint G_{3D}(\mathcal{G}) \sin\theta' d\theta' d\phi'$$

A partir de las anteriores probabilidades por unidad de tiempo se extraen las funciones de probabilidad angular de *scattering*, que se usarán para estimar la dirección final del vector de onda tras una interacción. Tales funciones coinciden con las que se obtuvieron para los fonones ópticos, por lo que las funciones de probabilidad en este caso son también las expresadas en las ecuaciones (2.29), (2.30) y (2.31). Completando la integración de las ecuaciones anteriores con las mismas aproximaciones que se realizaron para el *scattering* con los fonones ópticos, se obtiene

$$P_{HH,LH,SH}^{acu}(\varepsilon) = \frac{\Xi_0^2 \langle m_H^{3/2} \rangle \langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IH}}{2\sqrt{2\pi}\hbar^4\rho u^2} \left(\frac{N_{\langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IH}}}{N_{\langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IH}}+1} \right) \sqrt{\varepsilon \pm \langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IH}} \mathfrak{S}_H(\varepsilon \pm \langle\varepsilon_{acu}\rangle_{IH}) \quad (2.56)$$

$$P_{HL,LL,SL}^{acu}(\varepsilon) = \frac{\Xi_0^2 \langle m_L^{3/2} \rangle \langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IL}}{2\sqrt{2}\pi\hbar^4 \rho u^2} \left(\frac{N_{\langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IL}}}{N_{\langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IL}} + 1} \right) \sqrt{\varepsilon \pm \langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IL}} \mathfrak{I}_L(\varepsilon \pm \langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IL}) \quad (2.57)$$

$$P_{HS,LS,SS}^{acu}(\varepsilon) = \frac{\Xi_0^2 m_{so}^{3/2} \langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IS}}{2\sqrt{2}\pi\hbar^4 \rho u^2} \left(\frac{N_{\langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IS}}}{N_{\langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IS}} + 1} \right) \sqrt{\varepsilon \pm \langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IS} - \Delta_{so}} \mathfrak{I}_S(\varepsilon \pm \langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IS}) \quad (2.58)$$

En anteriores trabajos [Rodríguez-Bolívar, 2005a] se usó un potencial de deformación que incluía el promedio angular de la función $G_{3D}(\mathcal{G})$. Definiendo $\Xi_0^{*2} = \Xi_0^2 \langle G_{3D}(\mathcal{G}) \rangle$ se obtuvieron las siguientes tasas de *scattering*, equivalentes a las expresadas en las ecuaciones (2.56), (2.57) y (2.58):

$$P_{HH,LH,SH}^{acu}(\varepsilon) = \frac{\Xi_0^{*2} \langle m_H^{3/2} \rangle \langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IH}}{\sqrt{2}\pi\hbar^4 \rho u^2} \left(\frac{N_{\langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IH}}}{N_{\langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IH}} + 1} \right) \sqrt{\varepsilon \pm \langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IH}} \mathfrak{I}_H(\varepsilon \pm \langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IH}) \quad (2.59)$$

$$P_{HL,LL,SL}^{acu}(\varepsilon) = \frac{\Xi_0^{*2} \langle m_L^{3/2} \rangle \langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IL}}{\sqrt{2}\pi\hbar^4 \rho u^2} \left(\frac{N_{\langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IL}}}{N_{\langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IL}} + 1} \right) \sqrt{\varepsilon \pm \langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IL}} \mathfrak{I}_L(\varepsilon \pm \langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IL}) \quad (2.60)$$

$$P_{HS,LS,SS}^{acu}(\vec{k}) = \frac{\Xi_0^{*2} m_{so}^{3/2} \langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IS}}{\sqrt{2}\pi\hbar^4 \rho u^2} \left(\frac{N_{\langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IS}}}{N_{\langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IS}} + 1} \right) \sqrt{\varepsilon \pm \langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IS} - \Delta_{so}} \mathfrak{I}_S(\varepsilon \pm \langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IS}) \quad (2.61)$$

Las tasas de *scattering* correspondientes a los huecos *split-off* están definidas sólo para energías mayores que Δ_{so} .

En la Tabla 2.2 de la sección 2.2.1 se muestra el valor del potencial de deformación Ξ_0^* que se ha utilizado en este trabajo, obtenido a partir del ajuste de las curvas de velocidad de arrastre frente al campo eléctrico aplicado. La Figura 2.2 muestra las tasas totales de emisión y absorción del *scattering* de huecos pesados con fonones acústicos en función de la energía usando un modelo parabólico para una banda con la masa efectiva igual a la del fondo de la de la banda de valencia y con el modelo de banda de valencia desarrollado en este trabajo. La figura muestra significativas diferencias entre las tasas de *scattering* de los modelos no parabólico y parabólico, mostrando el primero unas tasas mayores de emisión y de absorción. Este ejemplo es, de nuevo, un indicador de la importancia de incluir la no parabolicidad en las tasas de *scattering*.

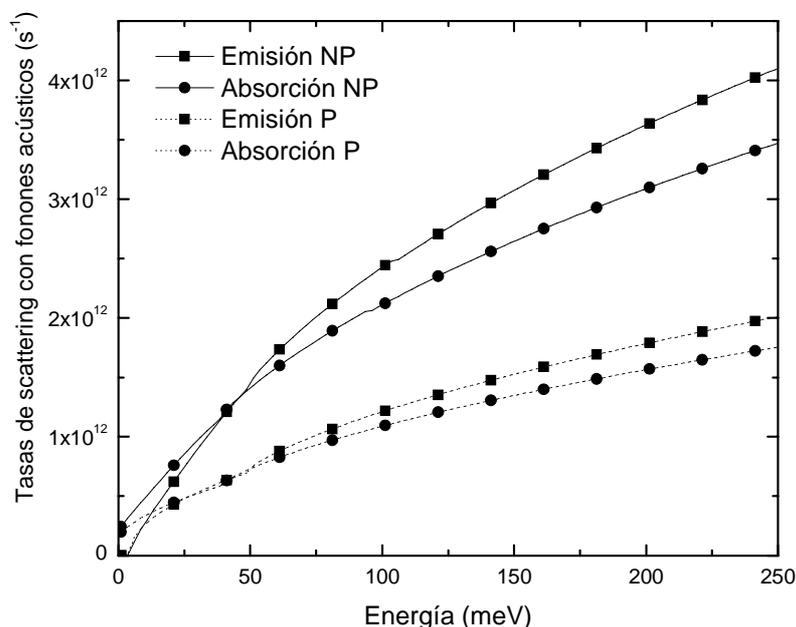


Figura 2.2: Tasas totales de emisión y absorción del *scattering* de huecos pesados con fonones acústicos en Si a 300 K usando el modelo de banda de valencia que se ha presentado (NP) y un modelo de banda de valencia parabólico (P).

2.3 *Scattering* con impurezas ionizadas

En los dispositivos electrónicos de semiconductor se emplean cristales en los que se ha introducido una cierta cantidad de impurezas para aumentar el número de portadores en el material, que por lo general implica que estos semiconductores así tratados tendrán conductividades mayores que cuando éstos se presentan en su estado puro. Sin embargo, la introducción de las impurezas rompe el potencial periódico de la red cristalina, y por tanto aparecen nuevos mecanismos de *scattering*. Se pueden distinguir dos tipos de *scattering* debido a impurezas: *scattering* con impurezas neutras y *scattering* con impurezas ionizadas. El primero de ellos es de escasa importancia [Erginsoy, 1950], ya que a las temperaturas de interés para el funcionamiento de un dispositivo prácticamente la totalidad de las impurezas se encuentran ionizadas, y por tanto tal mecanismo puede ser despreciado. No ocurre así con el segundo de los procesos de *scattering*, que afecta de forma apreciable a la movilidad de los portadores en los dispositivos, y por tanto será estudiado en este trabajo.

Cuando una impureza se ioniza, la nube de portadores libres incrementa su carga en Z electrones o huecos, quedando la impureza con una carga neta de $\pm Z|e|$ respectivamente, siendo $|e|$ la carga del electrón en valor absoluto. Por tanto, aparece un potencial electrostático alrededor de la impureza que altera el hamiltoniano periódico de la red:

$$\phi(r) = \frac{\pm Z|e|}{4\pi\epsilon_s r} \quad (2.62)$$

siendo r la distancia entre la impureza ionizada y el portador, y ϵ_s la constante dieléctrica del semiconductor. Ya que el hamiltoniano es el operador relacionado con la energía del sistema, la perturbación que introduce la ionización de las impurezas ionizadas se puede obtener multiplicando la ecuación (2.62) por la carga del portador. La interacción entre el portador y la impureza ionizada es de tipo elástico, por lo que el primero conservará su energía cuando sufra un *scattering* de este tipo.

Cuando se profundiza en el estudio resulta de gran importancia incluir los efectos que se derivan del apantallamiento del resto de los portadores libres, que harán menos intensa la interacción entre las impurezas ionizadas y las cargas libres. Existen tres tratamientos alternativos del problema: el de Conwell-Weisskopf (CW) [Conwell, 1950], el de Brooks-Herring (BH) [Brooks, 1951], y un tercer planteamiento, el de Ridley [Ridley, 1977], que encuentra la relación existente entre ambos y formula un método unificado para estudiar el *scattering* con impurezas ionizadas.

El formalismo de Conwell-Weisskopf considera el apantallamiento de una forma muy simple: desprecia la interacción coulombiana cuando el portador se encuentra a una distancia mayor que un cierto valor. El de Ridley, en cambio, considera el apantallamiento de una forma más complicada, aunque algunos autores consideran que éste se introduce *ad hoc* y que además carece de una base mecanocuántica [Kosina, 1999].

El formalismo de Brooks-Herring resulta mucho más adecuado para describir los fenómenos de apantallamiento. En este modelo se considera que el potencial coulombiano se atenúa exponencialmente con una longitud de apantallamiento β_s^{-1} que se puede calcular teóricamente.

$$\phi(r) = \frac{\pm Z|e|}{4\pi\epsilon_s r} e^{-\beta_s r} \quad (2.63)$$

En la formulación de Debye para semiconductores no degenerados la expresión de β_s es

$$\beta_s = \sqrt{\frac{|e|^2 n_I}{\epsilon_s k_B T}} \quad (2.64)$$

siendo n_I la densidad de portadores libres en el cristal, k_B la constante de Boltzmann y T la temperatura del cristal [Jacoboni, 1983]. Esta aproximación está justificada cuando la longitud de apantallamiento es más grande que la longitud de de Broglie del portador, o más concretamente, $4k^2 / \beta_s^2 \gg 1$. En el caso de semiconductores degenerados β_s se calcula de forma diferente [Chattopadhyay, 1981].

$$\beta_s = \sqrt{\frac{|e|^2 n_I \mathfrak{F}_{-1/2}(E_F / k_B T)}{\epsilon_s k_B T \mathfrak{F}_{1/2}(E_F / k_B T)}} \quad (2.65)$$

siendo $\mathfrak{F}_j(E_F / k_B T)$ la integral de Fermi-Dirac de orden j evaluada en $E_F / k_B T$, donde E_F es el nivel de Fermi. Merece la pena destacar que el formalismo de Brooks-Herring únicamente introduce la forma del potencial de interacción, y la longitud de apantallamiento que se considere se estima por otros procedimientos a partir de modelos más o menos complejos.

Para describir la interacción entre las cargas ionizadas del cristal y el hueco, partimos de la ecuación (2.2) teniendo en cuenta que en este caso el portador no altera su energía cuando la sufre ($\Delta = 0$). La perturbación del hamiltoniano se puede desarrollar en serie de Fourier de la siguiente forma

$$H'(\vec{r}) = |e|\phi(r) = \frac{(2\pi)^{3/2}}{V} \sum_{\vec{q}} H'(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \quad (2.66)$$

donde cada uno de los términos $H'(\vec{q})$ se obtiene a partir de

$$H'(\vec{q}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int H'(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} dV \quad (2.67)$$

El término de matriz $\langle \vec{k}', c' | H' | \vec{k}, c \rangle$ se calcula usando la expansión (2.66) de la siguiente forma

$$\langle \vec{k}', c' | H' | \vec{k}, c \rangle = \frac{(2\pi)^{3/2}}{VN} \sum_{\vec{q}} H'(\vec{q}) \int u_{\vec{k}'}^*(\vec{r}) u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i(\vec{q} + \vec{k} - \vec{k}')\cdot\vec{r}} dV \quad (2.68)$$

De esta ecuación se deduce la condición de conservación del momento en la interacción con la impureza ionizada, $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$, interpretándose el vector \vec{q} como el momento transferido a la impureza tras el *scattering* [Jacoboni, 1983]. De esta forma, el único de los términos que queda en la sumatoria de la expansión es el correspondiente al \vec{q} que satisfaga la conservación del momento. Para calcularlo en el caso de la interacción con huecos hacemos uso de la ecuación (2.67)

$$H'(\vec{q}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{\pm Z|e|^2}{4\pi\epsilon_s r} e^{-\beta_s r} e^{-iq \cdot r} dV \quad (2.69)$$

La integración proporciona el siguiente resultado

$$H'(\vec{q}) = \frac{\pm Z|e|^2}{4\pi\epsilon_s} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\beta_s^2 + q^2} \quad (2.70)$$

La tasa de *scattering* se obtiene incorporando el anterior resultado a la ecuación (2.6). Si en el semiconductor están presentes N_i impurezas ionizadas, estas tasas de *scattering* deben ser multiplicadas por dicho valor. Definiendo la concentración de impurezas ionizadas como $n_i = N_i / V$, la probabilidad por unidad de tiempo de que el portador pase de un estado \vec{k} a otro estado \vec{k}' es

$$P^{\text{Imp}}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi n_i Z^2 |e|^4}{\hbar V \epsilon_s^2} \frac{1}{[\beta_s^2 + q^2]^2} G_{3D}(\vartheta) \delta(\varepsilon' - \varepsilon) \quad (2.71)$$

Merece la pena destacar que, ya que el elemento de matriz $\langle c' | H'(\vec{q}) | c \rangle$ está elevado al cuadrado en la Regla de Oro de Fermi, tanto el signo del portador como el de la carga de la impureza ionizada es irrelevante en el cálculo, y por tanto en el caso de un dopado de tipo n como de tipo p las tasas de *scattering* son las mismas en el marco del estudio en el que se han desarrollado.

El paso siguiente consiste en efectuar la integración de la ecuación (2.71) en todos los estados finales posibles para un cierto estado inicial con energía ε . Por conveniencia se usará en la integración un sistema de referencia cuyo eje Z coincide con la dirección del vector de onda inicial del portador, y por tanto el diferencial de volumen del espacio K en coordenadas esféricas se escribe $dV_K = k'^2 \sin \vartheta d\vartheta dk' d\varphi$

$$P^{\text{Imp}}(\vec{k}) = \frac{n_i Z^2 |e|^4}{4\pi^2 \hbar \varepsilon_s^2} \iiint \frac{G_{3D}(\mathcal{G}) \sin \mathcal{G}}{[\beta_s^2 + q^2]^2} \delta(\varepsilon' - \varepsilon) k'^2 dk' d\mathcal{G} d\varphi \quad (2.72)$$

Integramos inicialmente en k' . Efectuando el cambio de variable del módulo del vector de onda final por la energía final e integrando, se obtiene

$$P_{HH, LH, SH}^{\text{Imp}}(\varepsilon) = \frac{n_i Z^2 |e|^4}{2^{3/2} \pi^2 \hbar^4 \varepsilon_s^2} \sqrt{\varepsilon} \mathfrak{T}_H(\varepsilon) \iint \frac{G_{3D}(\mathcal{G}) \sin \mathcal{G} m_H^{3/2}(\theta', \phi')}{[\beta_s^2 + q^2]^2} d\mathcal{G} d\varphi \quad (2.73)$$

$$P_{HL, LL, SL}^{\text{Imp}}(\varepsilon) = \frac{n_i Z^2 |e|^4}{2^{3/2} \pi^2 \hbar^4 \varepsilon_s^2} \sqrt{\varepsilon} \mathfrak{T}_L(\varepsilon) \iint \frac{G_{3D}(\mathcal{G}) \sin \mathcal{G} m_L^{3/2}(\theta', \phi')}{[\beta_s^2 + q^2]^2} d\mathcal{G} d\varphi \quad (2.74)$$

$$P_{HS, LS, SS}^{\text{Imp}}(\varepsilon) = \frac{n_i Z^2 |e|^4 m_{so}^{3/2}}{2^{3/2} \pi^2 \hbar^4 \varepsilon_s^2} \sqrt{\varepsilon - \Delta_{so}} \mathfrak{T}_S(\varepsilon) \iint \frac{G_{3D}(\mathcal{G}) \sin \mathcal{G}}{[\beta_s^2 + q^2]^2} d\mathcal{G} d\varphi \quad (2.75)$$

A partir de las anteriores ecuaciones es posible establecer las funciones de probabilidad angular para estimar la dirección del vector de onda final del portador tras el *scattering*. Teniendo en cuenta todos los factores que dependen de las direcciones inicial y final del vector de onda del portador, estas funciones son:

$$P_{HH, LH, SH}^{\text{Imp}}(\theta, \phi, \theta', \phi') = \frac{m_H^{3/2}(\theta', \phi') G_{3D}(\mathcal{G}) \sin \mathcal{G}}{[\beta_s^2 + q^2]^2} \quad (2.76)$$

$$P_{HL, LL, SL}^{\text{Imp}}(\theta, \phi, \theta', \phi') = \frac{m_L^{3/2}(\theta', \phi') G_{3D}(\mathcal{G}) \sin \mathcal{G}}{[\beta_s^2 + q^2]^2} \quad (2.77)$$

$$P_{HS, LS, SS}^{\text{Imp}}(\theta, \phi, \theta', \phi') = \frac{G_{3D}(\mathcal{G}) \sin \mathcal{G}}{[\beta_s^2 + q^2]^2} \quad (2.78)$$

La dependencia del vector \vec{q} de las direcciones inicial y final del portador se obtiene a partir de la siguiente expresión

$$q^2 = k^2 \left[1 + C_{IF}(\theta, \phi, \theta', \phi', \varepsilon) - 2\sqrt{C_{IF}(\theta, \phi, \theta', \phi', \varepsilon) \cos \mathcal{G}} \right] \quad (2.79)$$

Los subíndices I y F indican el tipo inicial y final del hueco en la transición respectivamente, y las funciones $C_{IF}(\theta, \phi, \theta', \phi', \varepsilon)$ se detallan a continuación [Gómez-Campos, 2005c]

$$C_{IF}(\theta, \phi, \theta', \phi', \varepsilon) = \begin{cases} \frac{m_F(\theta', \phi') \chi_I(\varepsilon)}{m_I(\theta, \phi) \chi_F(\varepsilon)} & ; \text{Transiciones HH, HL, LL, LH} \\ \frac{m_{so} \chi_I(\varepsilon)}{m_I(\theta, \phi) \chi_S(\varepsilon)} \frac{\varepsilon - \Delta_{so}}{\varepsilon} & ; \text{Transiciones HS, LS} \\ \frac{m_F(\theta', \phi') \chi_{so}(\varepsilon)}{m_{so} \chi_F(\varepsilon)} \frac{\varepsilon}{\varepsilon - \Delta_{so}} & ; \text{Transiciones SH, SL} \\ 1 & ; \text{Transiciones SS} \end{cases} \quad (2.80)$$

En los casos en que I o F sea un hueco pesado se usará para $m_I(\theta, \phi)$ o $m_F(\theta', \phi')$ la función definida en la ecuación (2.24). Para el caso en que I o F sea un hueco ligero se usará para tales funciones la ecuación (2.25).

Es muy importante indicar en este punto que la probabilidad angular de las ecuaciones (2.76), (2.77) y (2.78) es muy alta para las direcciones próximas a la del vector de onda del portador antes del *scattering*, y notablemente menor para otros ángulos (sólo cuando el portador tiene energías muy bajas la probabilidad no presenta este comportamiento). Esta fuerte anisotropía de las funciones de probabilidad angular es un inconveniente para desarrollar un simulador de Monte Carlo rápido que trate semiconductores dopados, como se mostrará más adelante. Aún así, en este trabajo se propone un método para considerar las anteriores probabilidades angulares de *scattering* en un simulador de Monte Carlo sin que ésto implique pérdida significativa de tiempo de computación.

La integración angular de las ecuaciones (2.73), (2.74) y (2.75) es muy costosa incluso en el sistema de referencia que se ha elegido para llevarla a cabo, puesto que en ella se mezcla el ángulo de *scattering* \mathcal{G} , que también está implícito en q^2 , con los ángulos θ , ϕ , θ' y ϕ' del sistema de referencia canónico del espacio K . Por tanto, para simplificar el integrando resulta muy útil sustituir en todos los cálculos los factores $m_H(\theta', \phi')$ y $m_L(\theta, \phi)$ por las masas promedio calculadas a partir de las ecuaciones (2.40) y (2.41). En concreto, la ecuación de la conservación del momento, ecuación (2.79), quedará de una forma más sencilla, al poderse escribir en función de las funciones $s_{IF}(\varepsilon)$ definidas en la ecuación (2.43) en vez de usar las funciones $C_{IF}(\theta, \phi, \theta', \phi', \varepsilon)$, ya que la dependencia angular de éstas últimas se elimina.

$$q^2 = k^2 \left[1 + s_{IF}(\varepsilon) - 2\sqrt{s_{IF}(\varepsilon)} \cos \mathcal{G} \right] \quad (2.81)$$

Con esta aproximación, las integrales (2.73), (2.74) y (2.75) se pueden realizar analíticamente. En cada caso, y atendiendo a si la transición es de tipo intra o interbanda, se usa la correspondiente expresión de la función $G_{3D}(\mathcal{G})$ dada por las ecuaciones (2.9) y (2.10). Ya que las integrales no dependen de la variable φ , la integración da lugar a un factor 2π . Para obtener la integral en \mathcal{G} es muy útil el siguiente cambio de variable

$$z = \beta_s^2 + k^2 [1 + s_{IF}(\varepsilon) - 2\sqrt{s_{IF}(\varepsilon)} \cos \mathcal{G}] \quad (2.82)$$

Con éste, las integrales se pueden calcular con los métodos analíticos habituales. Una vez evaluadas éstas se tienen las tasas de *scattering* con impurezas ionizadas, que se pueden escribir de una forma compacta como sigue

$$P^{\text{Imp}}(\varepsilon) = \frac{Z^2 n_i |e|^4}{2^5 \pi \sqrt{2m_I \varepsilon_s^2}} \frac{\mathfrak{I}_F(\varepsilon) \chi_I^2(\varepsilon)}{\varepsilon^{3/2}} \left(\frac{m_F}{m_I}\right)^{3/2} Y_{\text{intra,inter}} \quad (2.83)$$

Los subíndices I y F se refieren al estado inicial y final del hueco respectivamente. Las funciones Y_{intra} e Y_{inter} se usan en transiciones intra e interbanda respectivamente.

Definiendo la variable $y \equiv k^2 / \beta^2$, estas funciones quedan de la forma:

$$Y_{\text{intra}}(y) \equiv 3 - 3 \left[1 + \frac{1}{2y} \right] \text{Ln}[1 + 4y] + \left[4 + \frac{3}{y} + \frac{3}{4y^2} \right] \frac{4y^2}{[1 + 4y]} \quad (2.84)$$

$$Y_{\text{inter}}(y, s_{IF}(\varepsilon)) \equiv \frac{3}{\sqrt{s_{IF}(\varepsilon)}} \left\{ -\frac{2}{\sqrt{s_{IF}(\varepsilon)}} + \right. \\ \left. + \left[\frac{1 + y[s_{IF}(\varepsilon) + 1]}{2s_{IF}(\varepsilon)y} \right] \text{Ln} \left[1 + \frac{4\sqrt{s_{IF}(\varepsilon)}y}{1 + y\{1 + s_{IF}(\varepsilon) - 2\sqrt{s_{IF}(\varepsilon)}\}} \right] \right\} \quad (2.85)$$

Como ejemplo, en la Figura 2.3 se muestran las curvas de las tasas de *scattering* con impurezas ionizadas para Si a 300 K con una concentración de impurezas $n_i = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

Para las transiciones HH, HL, LH y LL se puede observar un comportamiento común en las curvas, experimentándose un incremento abrupto de la tasa de *scattering* a muy bajas energías, y posteriormente un decaimiento que puede ser muy importante, como en el caso de las curvas LH y HL. Esto provoca que a bajas energías el mecanismo de *scattering* dominante sea el de impurezas ionizadas, produciéndose muchas más interacciones de este tipo que de fonones. Sin embargo el hecho de que este mecanismo sea elástico y de

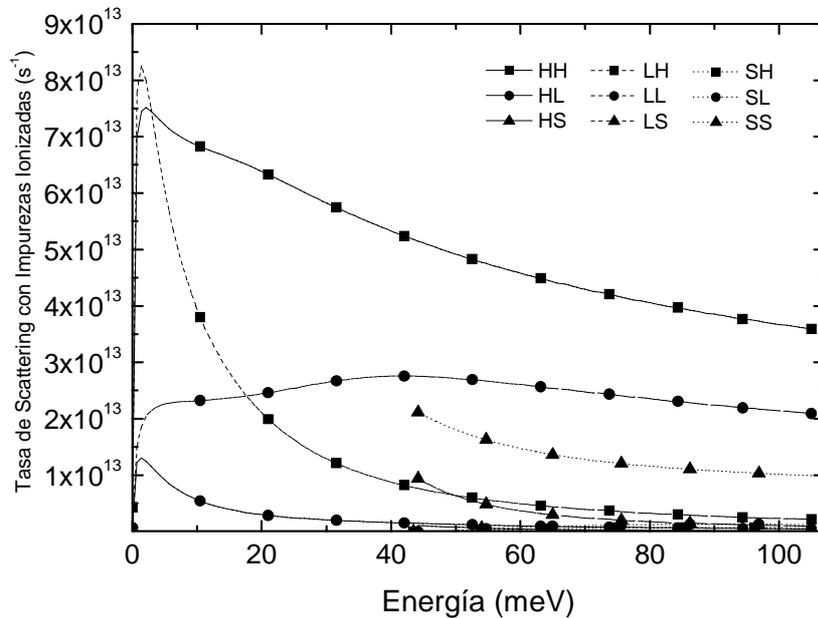


Figura 2.3: Tasas de *scattering* con impurezas ionizadas en Si a 300 K para una concentración de impurezas de 10^{18} cm^{-3} . Cada curva es la tasa de *scattering* de una transición en concreto indicada en la leyenda por dos letras, siendo la primera de ellas el tipo de hueco inicial y la segunda el tipo de hueco final tras el *scattering*.

“pequeño ángulo” propicia que se necesiten decenas de miles de *scatterings* para que este mecanismo influya apreciablemente en la dinámica del hueco.

El resto de transiciones tienen un comportamiento decreciente y, en general, no son tan importantes como las anteriores.

2.4 Implementación de las probabilidades de *scattering* en el simulador Monte Carlo

Una vez que se han desarrollado las expresiones teóricas de las probabilidades angulares y de las tasas de *scattering* de los mecanismos más relevantes procedemos a su implementación en un simulador basado en el método Monte Carlo. En esta sección se

describirá brevemente los pasos que se siguieron para implementar el simulador y se mostrarán los problemas que presentó esta tarea y cómo fueron resueltos. En particular se indicará cómo se consiguió resolver el problema de la lentitud del cálculo para seleccionar el estado final tras un *scattering* con impurezas ionizadas.

2.4.1 Esquema de funcionamiento del simulador Monte Carlo

Tiempo de vuelo libre

Un portador que se encuentra en el seno de un semiconductor sometido a la acción de un campo eléctrico externo experimenta variaciones tanto en su vector de onda como en su energía de manera continua a lo largo del proceso de arrastre. Ya que a lo largo del vuelo libre el portador cambia su energía, las tasas de *scattering* de cada uno de los mecanismos considerados también varían a lo largo del vuelo, y por consiguiente la probabilidad de que un portador experimente un vuelo libre de duración t es

$$\exp\left[-\int_0^t P^{Total}(\varepsilon(t'))dt'\right] \quad (2.86)$$

siendo $P^{Total}(\varepsilon)$ la tasa total de *scattering*, que se obtiene sumando las tasas de *scattering* de todos los mecanismos que se consideren. Resulta muy costoso desde el punto de vista computacional utilizar dicha expresión para estimar la duración del vuelo libre, por lo que habitualmente se usa la técnica del *autosattering*, introducida por Rees [Rees, 1969], que consiste en la introducción de un mecanismo de *scattering* ficticio adicional que haga la tasa total de *scattering* igual a una constante Γ para todo el rango de energías en las que se va a mover el portador, $P^{Total}(\varepsilon) = \Gamma$. Usando esta técnica se puede estimar de una forma muy sencilla la duración de un vuelo libre a partir de una variable aleatoria r que se obtenga a partir de la distribución de probabilidad constante en el intervalo]0, 1] como

$$t = -\frac{\ln r}{\Gamma} \quad (2.87)$$

Arrastre en el espacio K

Conocido el vector de onda del hueco en su estado inicial, \vec{k}_0 , se puede obtener el vector de onda tras el tiempo de vuelo libre integrando en la ecuación (2.1), recordando que la carga del hueco será $+|e|$,

$$\vec{k}(t) = \vec{k}_0 + \frac{|e|}{\hbar} \vec{E}t \quad (2.88)$$

Determinación del mecanismo de scattering

Una vez que se ha simulado el arrastre durante el tiempo de vuelo, se determinará qué tipo de *scattering* se produce. Cada uno de los mecanismos de *scattering* afectará de forma distinta al portador, por lo que es necesario determinar cual de los mecanismos ha sido el causante del *scattering* para poder estimar convenientemente cómo se va a ver afectado el estado del hueco. Por eso se evalúan las tasas de *scattering* de cada uno de los mecanismos presentes para el valor de la energía final del portador tras el arrastre, incluyendo el mecanismo de *autoscattering*, y se le asigna a cada uno una probabilidad proporcional a su tasa de *scattering*. Finalmente se determina qué mecanismo de *scattering* ha interrumpido el proceso de arrastre a partir de tales probabilidades.

Determinación del estado tras el scattering

Para conocer el estado del portador tras el *scattering* es necesario determinar la energía y el momento de éste. El cálculo de la energía tras el *scattering* se resuelve de manera trivial sumando o restando la cantidad de energía correspondiente, dependiendo de si se ha producido una absorción o una emisión. En el caso de los mecanismos de *scattering* elásticos la energía del portador no cambiará.

Con respecto al momento del portador, su dirección final se determina a partir de las expresiones de probabilidad angular de cada uno de los mecanismos, ecuaciones (2.29), (2.30), (2.31), (2.76), (2.77) y (2.78). Para aplicarlas es necesario tener en cuenta que se

trata de la probabilidad de que el vector de onda tenga una dirección comprendida entre $[\theta', \theta'+d\theta']$ y entre $[\phi', \phi'+d\phi']$ tras el *scattering*.

$$P(\theta, \phi, \theta', \phi') d\theta' d\phi' \quad (2.89)$$

El procedimiento inmediato para aplicar éstas sería obtener parejas de valores (θ', ϕ') y emplear la técnica de rechazo para aceptar o desechar tal dirección. No obstante, resulta mucho más eficiente efectuar una sencilla transformación en las anteriores probabilidades de *scattering* con el fin de usar $(1-\cos\theta')$ en vez de θ' como variable aleatoria. Teniendo en cuenta que $d(1-\cos\theta') = \text{sen}\theta' d\theta'$, la ecuación (2.89) es

$$\frac{P(\theta, \phi, 1-\cos\theta', \phi')}{\text{sen}\theta'} d(1-\cos\theta') d\phi' \quad (2.90)$$

Por tanto, transformando las funciones de probabilidad angular de manera que éstas dependan de $\cos\theta'$ en vez de θ' , y dividiendo éstas por $\text{sen}\theta'$, obtenemos una nueva función de probabilidad angular esencialmente idéntica a la anterior pero mucho más eficiente cuando se implementa la técnica de rechazo. Además, ya que el diferencial del ángulo sólido contiene el factor $\text{sen}\theta'$, la transformación de la ecuación (2.90) se lleva a cabo sencillamente.

Cuando las probabilidades de *scattering* se desarrollan en el sistema de referencia cuyo eje z coincide con la dirección del vector de onda inicial, la misma transformación puede llevarse a cabo sustituyendo en los anteriores razonamientos las coordenadas (θ', ϕ') por (ϑ, φ) .

Finalmente, si por el procedimiento de selección del mecanismo de *scattering* se determinase que se ha producido un auto-*scattering*, por el carácter ficticio del mismo se mantendrá inalterable el estado del portador y continuará el vuelo.

Una vez que se ha determinado el estado final tras el *scattering*, se vuelve a determinar el tiempo de vuelo libre y se repite el procedimiento descrito.

2.4.2 Mejora en el algoritmo de determinación del estado final tras el *scattering* con impurezas ionizadas

Las expresiones de probabilidad angular de *scattering* que se han desarrollado en este trabajo son demasiado complejas como para poder aplicar una técnica directa de determinación de valores aleatorios de acuerdo con ellas. Por eso se ha recurrido a la técnica de rechazo para poder aplicarlas [Jacoboni, 1983], y se han obtenido resultados en tiempos de computación cortos en simulaciones donde los mecanismos de *scattering* presentes eran los debidos a los fonones óptico y acústicos. No obstante, cuando se implementaron las probabilidades angulares de *scattering* debidas a las impurezas ionizadas se observó que la técnica de rechazo era muy ineficiente. Como ya se indicó, la causa es la gran anisotropía de dichas probabilidades, ya que existe una probabilidad muy alta para ángulos de *scattering* muy pequeños y prácticamente nula para el resto de ángulos de *scattering*. Con el fin de ilustrar esta anisotropía estudiaremos las transiciones intrabanda de huecos pesados para varios valores de la variable auxiliar y definida en la sección 2.3. Por simplicidad se eliminará la dependencia angular de $m_H(\theta', \phi')$ en la ecuación (2.76) y en la conservación del momento, ecuación (2.79), sustituyéndose por un valor promedio. Con estas aproximaciones la probabilidad angular se reduce a:

$$P_{HH, Aprox.}^{Imp}(\cos \vartheta) = \frac{G_{3D, intra}(\vartheta)}{[1 + 2y \times [1 - \cos \vartheta]]^2} = \frac{1/4 \times [1 + 3\cos^2 \vartheta]}{[1 + 2y \times [1 - \cos \vartheta]]^2} \quad (2.91)$$

Esta expresión es mucho más sencilla de estudiar y sirve para analizar las características de “pequeño ángulo” del *scattering* con impurezas ionizadas. En la Figura 2.4 se ha representado (2.91) para varios valores del parámetro y . Se observa un máximo muy pronunciado para el ángulo de *scattering* cero, siendo dicho máximo más acusado cuanto mayor es el valor de y . En una simulación típica es frecuente que el parámetro y tome valores del orden de las unidades o decenas y , como se puede deducir de la figura, esto origina que se produzcan un gran número de rechazos cuando se aplica la técnica de rechazo con una probabilidad angular de este tipo.

Por este motivo otros autores han abordado este problema en trabajos anteriores usando otras técnicas para obtener valores según distribuciones de probabilidad del tipo de la ecuación (2.91) [Wenkebach, 2002]. En este sentido, la técnica combinada es un buen instrumento de cálculo [Jacoboni, 1983]. Esta técnica es similar a la de rechazo, con la diferencia de que los valores de las variables independientes y de la función de probabilidad no se obtienen de forma equiprobable en cada uno de los rangos de variación de estas magnitudes, sino que se emplea una función de probabilidad auxiliar para generarlos, P_{sup} , que tiene una serie de características:

- i) para los mismos valores de las variables independientes, la función de probabilidad auxiliar propuesta debe tomar siempre valores más altos que la función de probabilidad original.
- ii) La función de probabilidad auxiliar propuesta debe ser integrable, y después de efectuar la integración debe ser posible despejar el valor de la variable independiente.

El objetivo de esta técnica es proporcionar valores aleatorios de acuerdo con la función

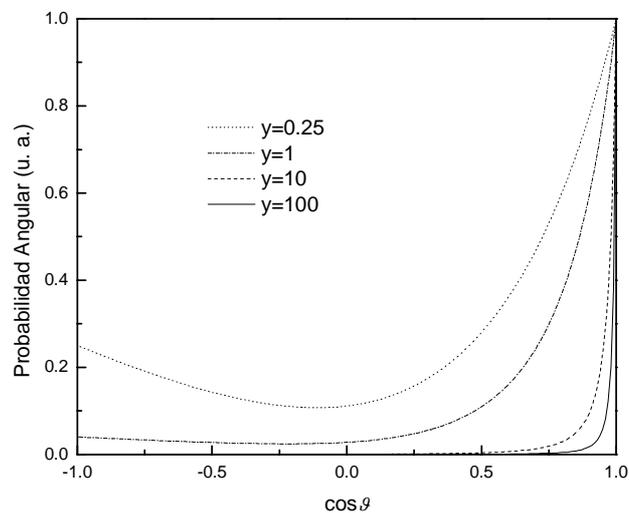


Figura 2.4: Probabilidad angular de *scattering* con impurezas ionizadas de la ecuación (2.91) frente al coseno del ángulo de *scattering* ϑ . Obsérvese la alta probabilidad que presenta $\cos \vartheta = 1$, que es equivalente a $\vartheta = 0$, por lo que lo más probable es que el vector de onda del hueco no cambie apreciablemente su dirección al experimentar el *scattering*.

de probabilidad auxiliar propuesta, y posteriormente se lleva a cabo la técnica de rechazo según la función de probabilidad original.

Antes de proponer una función de probabilidad para usar la técnica combinada examinamos las probabilidades angulares de las ecuaciones (2.76), (2.77) y (2.78) para ver si es aceptable una aproximación que nos lleve a una probabilidad más sencilla, del tipo de la ecuación (2.91), y a partir de ésta aplicar la técnica combinada. En definitiva, lo que nos planteamos es estudiar el efecto que tiene la anisotropía en las probabilidades angulares de *scattering*. Si este efecto fuese despreciable, la función de probabilidad de la ecuación (2.91) podría ser considerada como una buena aproximación y podría ser tomada como punto de partida para el estudio. En la Figura 2.5 se muestran las probabilidades angulares de *scattering* en función de la dirección en el plano x - y para $y=0.25$ e $y=1$ en una transición HH partiendo de un hueco pesado con vector de onda inicial orientado según la dirección [100]. Para estos valores de la variable y las probabilidades angulares de *scattering* difieren significativamente, y aunque a altos valores de y las diferencias se atenúan, sería importante no despreciar los efectos de la anisotropía de la banda en los cálculos. Además, es importante destacar que un valor de y pequeño se corresponde con una energía pequeña, y es en la región de bajas energías donde el portador experimentará un número mayor de *scatterings* con impurezas ionizadas, por lo que la influencia de la anisotropía puede ser muy notable en los resultados.

Se puede extraer la misma conclusión cuando se observan las probabilidades angulares de *scattering* HH representadas en tres dimensiones. En la Figura 2.6 se muestran las probabilidades angulares de *scattering* para varios valores de la variable y y direcciones iniciales del vector de onda. Para valores pequeños de y se observa claramente la influencia de la anisotropía de la banda.

De esta forma queda probado que la aproximación de la ecuación (2.91) no es del todo adecuada, y que para un estudio de las probabilidades angulares de *scattering* de huecos con impurezas ionizadas más acorde con la física del problema debería partirse de las expresiones (2.76), (2.77) y (2.78).

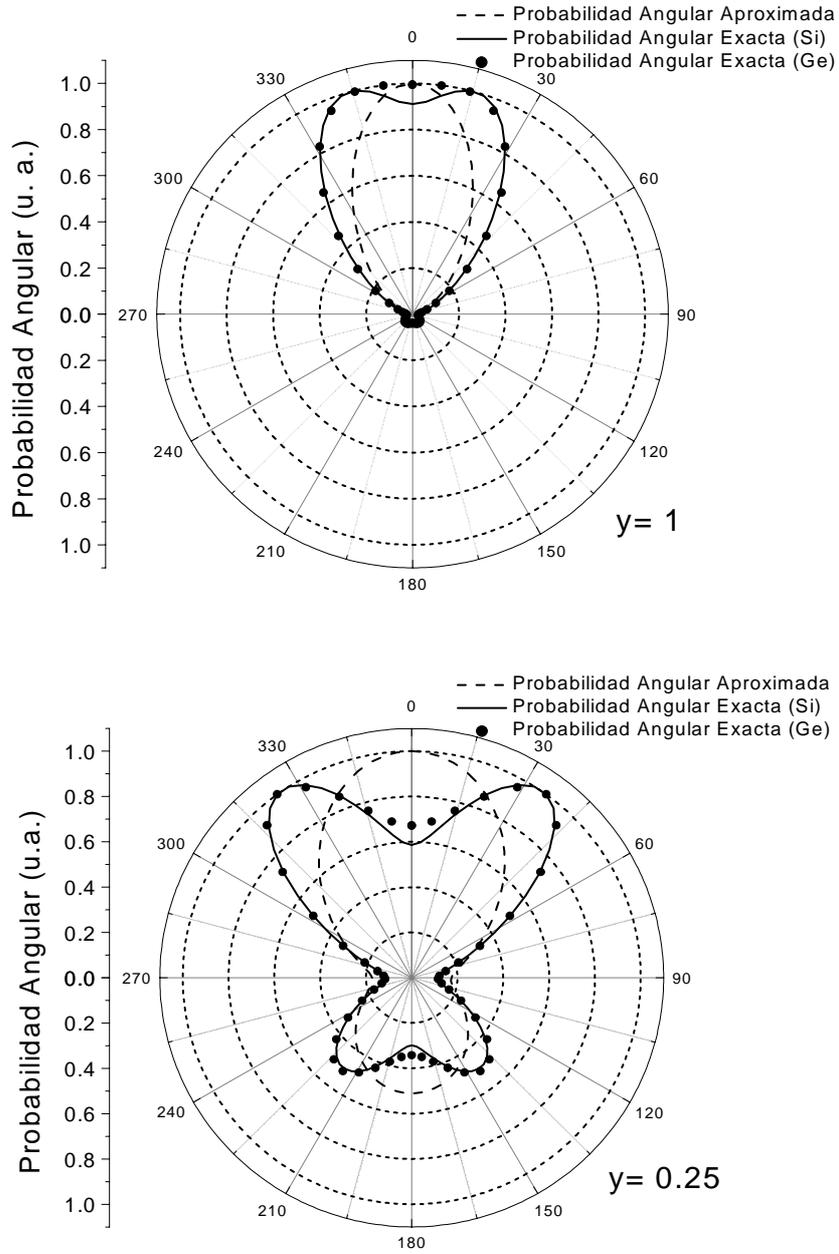


Figura 2.5: Influencia de la anisotropía en la probabilidad angular de *scattering* del hueco para transiciones en las que el vector de onda inicial está orientado en la dirección [100] y el vector de onda final está contenido en el plano $k_z=0$ (esto es, $P[(k,0,0), (k'_x, k'_y, 0)]$) para valores pequeños de la variable adimensional y . Se pueden observar diferencias notables entre la probabilidad angular de *scattering* exacta y la aproximada, que usa un promedio angular de la masa efectiva. Por simplicidad se ha tomado el máximo de la probabilidad igual a la unidad.

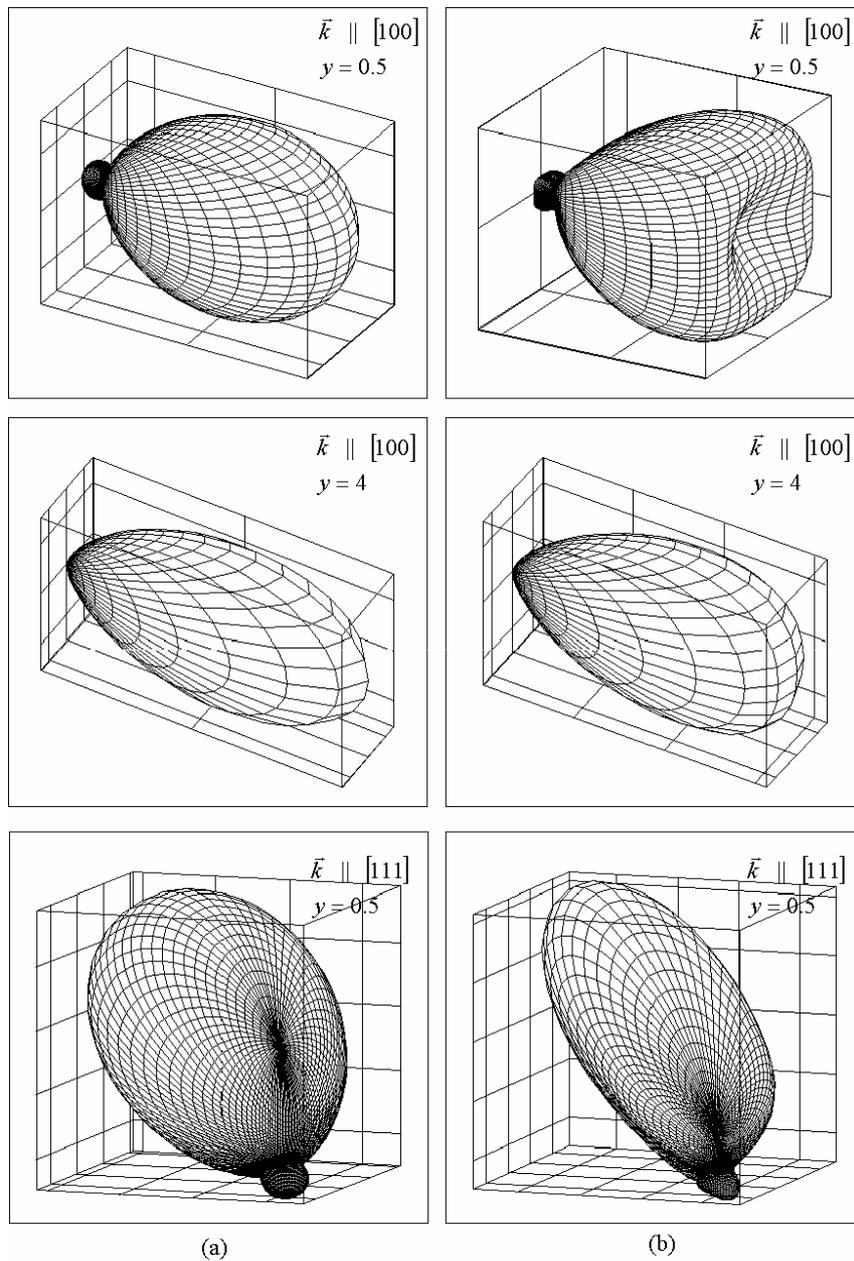


Figura 2.6: Probabilidades angulares de *scattering* para transiciones con vectores de onda iniciales orientados según [100] y [111] y para varios valores de la variable y en (a) banda esférica y (b) banda anisótropa de Si.

Analizando con detenimiento las probabilidades angulares de *scattering* de las ecuaciones correspondientes, determinamos una función de probabilidad angular P_{sup} que verifica las condiciones i) y ii) para llevar a cabo la técnica combinada. Por la condición i) es necesario que la función propuesta P_{sup} sea siempre mayor que la función de probabilidad original. Por ello sustituiremos el numerador por su valor máximo $G_{3D,\text{max}} m_{F,\text{max}}^{3/2}$, siendo $G_{3D,\text{max}}$ el máximo valor de la función de solapamiento correspondiente $G_{3D}(\vartheta)$, $m_{F,\text{max}}$ es el máximo valor de la función angular de masa efectiva, ecuaciones (2.24) y (2.25), y siendo F el tipo final de hueco. En una segunda etapa, minimizamos el denominador de la función de probabilidad. La primera aproximación para hacerlo fue contemplar la peor posibilidad, esto es, *scattering* intrabanda con un ángulo de *scattering* $\vartheta = 0$. Este caso implica que no habrá cambio en el vector de onda, y por tanto el momento trasferido en la interacción, \bar{q} , será nulo según la ecuación (2.79) de conservación de momento. Sin embargo, un serio inconveniente de esta minimización es que el denominador pierde su dependencia de y , y por tanto el algoritmo no sería eficiente. La técnica combinada es tanto más potente cuanto más parecidas sean la función de probabilidad propuesta y la función de probabilidad original, por lo que intentamos una segunda aproximación para obtener una expresión de P_{sup} que mantenga la variable y en el denominador. En esta segunda aproximación minimizamos el denominador suponiendo que la función $C_{IF}(\theta, \phi, \theta', \phi', \varepsilon)$ puede tomar un valor cualquiera. De esta manera, podría usarse la misma función P_{sup} para todos los tipos de hueco y para todos los semiconductores, independientemente de la forma que tome la anisotropía y la no parabolicidad de la banda. Con estas consideraciones se obtuvo la siguiente función $P_{\text{sup}}(y, \vartheta)$ [Gómez-Campos, 2004a], [Gómez-Campos, 2004b]:

$$P_{\text{sup}}(y, \vartheta) = \begin{cases} \vartheta \in [0, \pi/2] \\ \vartheta \in [\pi/2, \pi] \end{cases} \begin{cases} P_{\text{sup}}(y, \vartheta) = \frac{G_{\text{max}} m_{f,\text{max}}^{3/2}}{1 + y(1 - \cos^2 \vartheta)} \\ P_{\text{sup}}(y, \vartheta) = \frac{G_{\text{max}} m_{f,\text{max}}^{3/2}}{1 + y}; y < 2 \\ P_{\text{sup}}(y, \vartheta) = \frac{G_{\text{max}} m_{f,\text{max}}^{3/2}}{1 + y(1 + 3 \cos^2 \vartheta)}; y \geq 2 \end{cases} \quad (2.92)$$

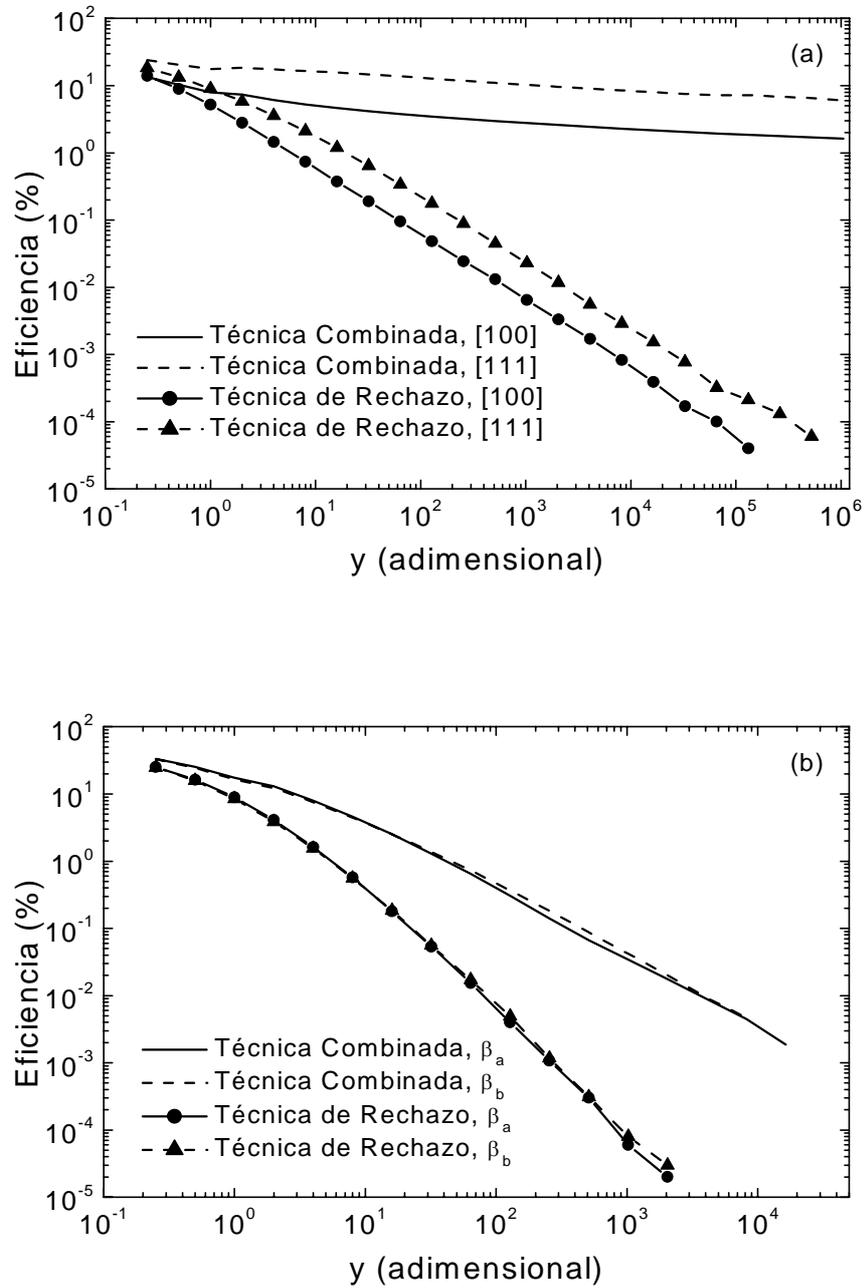


Figura 2.7: Comparación del porcentaje de eficiencia en Si entre el modelo propuesto y la técnica de rechazo para (a) *scattering* intrabanda HH con vectores de onda iniciales orientados en las direcciones [100] y [111] y (b) *scattering* interbanda HL con vector de onda inicial orientado en la dirección [100] para dos valores distintos de la longitud de apantallamiento, $\beta_a=2.54\cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$; $\beta_b=1.59\cdot 10^9 \text{ m}^{-1}$, relacionados con ($n_l = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $T = 300 \text{ K}$) y ($n_l = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, $T = 77 \text{ K}$) respectivamente.

Los valores máximos de la ecuación (2.92) se pueden obtener sin dificultad al ser analíticas las funciones mencionadas. Esta función es integrable y es posible despejar el $\cos \theta$ de las mismas.

Con el propósito de mostrar las ventajas del uso de la técnica combinada usando la probabilidad angular auxiliar de la ecuación (2.92), se definió la eficiencia como el porcentaje de aceptaciones del total de intentos que se realizan a lo largo del cálculo. En la Figura 2.7 se comparan las eficiencias de la técnica de rechazo con la técnica combinada usando la función de la ecuación anterior para un amplio rango de valores de la variable y .

Como se observa en las figuras, la técnica combinada aplicada usando la función de probabilidad de la ecuación (2.92) mejora notablemente la eficiencia de la técnica de rechazo, que presenta un gran número de rechazos para valores medios y altos del parámetro y . Para valores bajos de y la primera es el doble de eficiente que la segunda, mientras que para los valores más altos ilustrados en la Figura 2.7 la primera sería aproximadamente 10^3 - 10^4 veces más rápida que la de rechazo.

2.5 Comprobación de la validez de las probabilidades de *scattering* a campo cero

Una de las magnitudes de interés en el estudio del transporte de portadores en semiconductores es la movilidad óhmica. Para calcularla es deseable conocer de manera precisa los procesos físicos que tienen lugar en el seno del semiconductor a bajos campos y en un amplio rango de temperaturas. Por consiguiente, resulta conveniente hacer un estudio de estos procesos a campo cero y bajas temperaturas con el objetivo de poder modelarlos correctamente.

Como se ha mostrado en la sección 1.4 es posible conocer teóricamente el valor de magnitudes del gas de huecos en equilibrio tales como su energía media o la población de cada una de las bandas. Un mecanismo de *scattering* correctamente modelado debe dar resultados semejantes a los teóricos cuando no se aplica campo eléctrico. Aunque este hecho no es suficiente para garantizar que el simulador va a dar buenos resultados en cualquier condición de trabajo, sí es necesario que esto se satisfaga. Por este motivo es

fundamental llevar a cabo un estudio en el equilibrio comparando los resultados del simulador con los teóricos antes de continuar esta investigación.

Merece la pena destacar que, cuando en la sección 1.4 se obtuvieron los valores de las magnitudes en el equilibrio, no se hizo mención alguna a los mecanismos de *scattering* que se estaban considerando en el cristal, ya que es un resultado que depende exclusivamente de la estructura de bandas. Por tanto, los resultados teóricos deben reproducirse no sólo cuando actúan simultáneamente todos los mecanismos de *scattering*, sino también cuando lo hacen por separado. En este sentido, puede ya adelantarse el hecho de que el *scattering* con impurezas ionizadas no debería incluirse en este análisis, ya que no será capaz de darnos información sobre las magnitudes en equilibrio. Si fuese éste el único mecanismo de *scattering* presente en una simulación de equilibrio observaríamos que la energía del portador permanece constante a lo largo de toda la simulación e igual al valor inicial de energía que se le hubiera asignado. Por tanto no aportaría datos sobre la energía media del gas de huecos, y tampoco lo haría para la población de las bandas, ya que no exploraría las bandas a lo largo de la simulación. De esta forma, el estudio en equilibrio debe centrarse en el análisis de las tasas de *scattering* con fonones ópticos y acústicos. La mayor parte de las simulaciones que se llevaron a cabo en este apartado incluyeron ambos mecanismos actuando simultáneamente. No obstante, en la sección 2.5.3 se dedica un apartado al estudio del *scattering* con fonones ópticos para comprobar que, por sí solos, son capaces de suministrar los valores adecuados de las magnitudes en equilibrio a pesar de sus altos valores de energía.

En las simulaciones se han usado los valores de los potenciales de deformación ópticos y acústicos de la Tabla 2.2, que como se mostrará en la sección 2.6 fueron obtenidos ajustando las curvas de velocidad de arrastre frente a campo eléctrico aplicado con los resultados experimentales. Aunque algunos autores [Fischer, 2000] proponen procedimientos para calcular sin ambigüedad los valores de estos potenciales, al final de esta sección se demostrará que en el caso del equilibrio es posible hacer una elección arbitraria de estos potenciales sin que la misma influya en los valores de las magnitudes.

2.5.1 Estudio de la población relativa de las bandas en equilibrio

Por el principio de ergodicidad se puede calcular la población relativa de una banda en un simulador Monte Carlo de una sola partícula teniendo en cuenta la fracción del tiempo total de simulación que el portador pasa en la misma. Esto será así siempre que todas las bandas sean accesibles, y en este estudio lo son. En la Figura 2.8 se muestran las

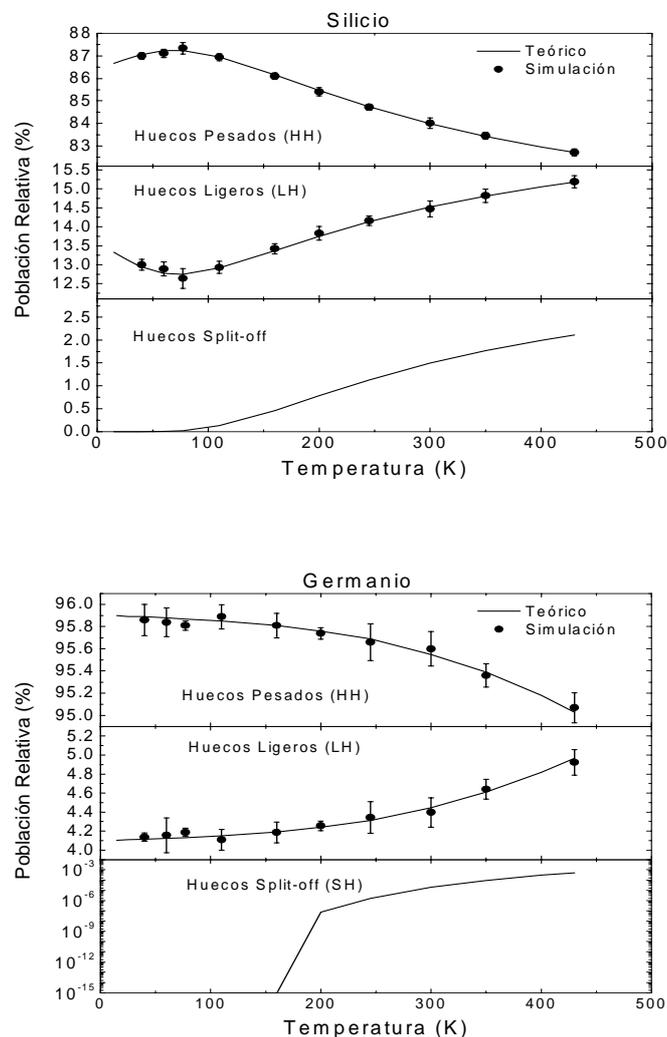


Figura 2.8: Poblaciones relativas teóricas y simuladas (con intervalos de error) para cada banda en Si y Ge.

poblaciones relativas de las bandas calculadas teóricamente, ecuaciones (1.41), (1.42) y (1.43), y a partir de los resultados del simulador de tiempo de permanencia en cada una de las bandas considerando el *scattering* con fonones ópticos y acústicos.

Se observa un excelente acuerdo entre los resultados teóricos y del simulador. Con respecto a la banda de huecos *split-off*, su baja población hace necesarios tiempos de computación extremadamente largos para poder reducir el intervalo de error hasta valores razonables. No obstante, el buen acuerdo obtenido para los huecos pesados y ligeros hace pensar que el simulador también sería capaz de proporcionar poblaciones relativas de la banda de *split-off* de acuerdo con las teóricas si se llegasen a llevar a cabo las simulaciones.

En consecuencia puede tomarse este resultado como un indicador de que los mecanismos de *scattering* han sido modelados adecuadamente, para tener en cuenta la estructura de banda de valencia con *anisotropía* y no parabolicidad.

2.5.2 Estudio de las funciones de distribución de energías de las bandas en equilibrio

De igual manera que se puede estudiar la población relativa de las bandas a partir del tiempo que pasa el portador en cada una de ellas, también se puede calcular la función de distribución en energías en equilibrio usando el simulador Monte Carlo a partir de los tiempos que pasa el portador en cada uno de los intervalos de energía. Puesto que el simulador no introduce los efectos del principio de exclusión de Pauli en los cálculos [Jacoboni, 1983], la función de distribución en energías teórica debería ser aquella que considera la ocupación de la banda usando la estadística de Maxwell-Boltzmann, ecuaciones (1.36), (1.37) y (1.38). Esto será válido para semiconductores puros o poco dopados, donde la naturaleza fermiónica de los huecos no va a manifestarse de forma importante. En la Figura 2.9 se representan tales funciones de distribución de energías teóricas y calculadas usando el simulador.

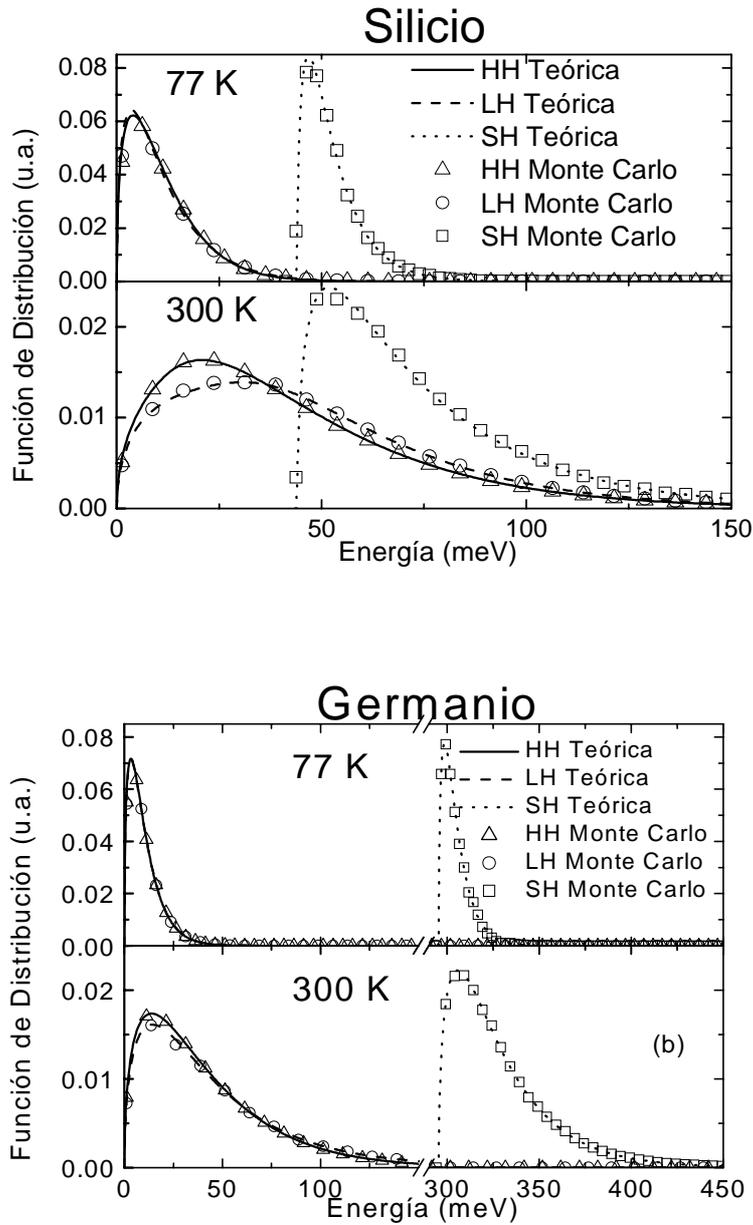


Figura 2.9: Funciones de distribución de huecos para cada una de las bandas en (a) Si y (b) Ge. El eje de abscisas de esta última ha sido cortado por conveniencia

Existe un buen acuerdo entre las funciones de distribución de energías teóricas y las obtenidas con el simulador tanto a bajas como altas energías. Este hecho podría ya considerarse como definitivo para aceptar que las probabilidades de *scattering* que se usan en este trabajo van a ser adecuadas para la descripción de la física del sistema, al menos cuando se efectúen estudios no muy lejos del equilibrio.

2.5.3 Estudio de la energía media del gas de huecos

Una vez que se ha comprobado que las funciones de distribución en energías obtenidas con el simulador Monte Carlo se ajustan a las teóricas, se puede deducir inmediatamente que también los resultados del simulador sobre energía media del gas de huecos estarán en acuerdo con los valores teóricos obtenidos a partir de las ecuaciones (1.44) y (1.45). Se llevaron a cabo varias simulaciones en Si y en Ge en un extenso rango de temperaturas i) inhabilitando las transiciones interbanda que cambiaran el tipo de hueco, con el fin de obtener la energía media de un gas de huecos pesados, ligeros o *split-off* y ii) habilitando todas las transiciones para obtener la energía media del gas de huecos en el semiconductor. Los resultados se compararon con los teóricos en la Figura 2.10 y se encontró un acuerdo excelente entre ambos. Con respecto al cálculo de la energía media de todo el gas, la comparación confirma el procedimiento que se siguió para su cálculo teórico, usando una media que ponderaba la energía media de cada uno de los tipos de hueco con su población relativa.

Se observa que los valores de energía media de los gases de huecos se alejan de la relación $\varepsilon = \frac{3}{2}k_B T$ a temperaturas por encima de los 50 K como consecuencia de la no parabolicidad de las bandas. Los gases de huecos pesados y ligeros muestran energías medias siempre por encima de la energía media del principio de equipartición mientras que los huecos *split-off* tienen una energía media siempre por debajo de este valor. La explicación de esta tendencia es la diferente forma de las funciones $\mathfrak{Z}(\varepsilon)$. Si la función $\mathfrak{Z}(\varepsilon)$ de la banda es mayor que la unidad, el gas presenta una energía media por encima de los valores del principio de equipartición, y a la inversa si la función $\mathfrak{Z}(\varepsilon)$ de la banda es menor que la unidad.

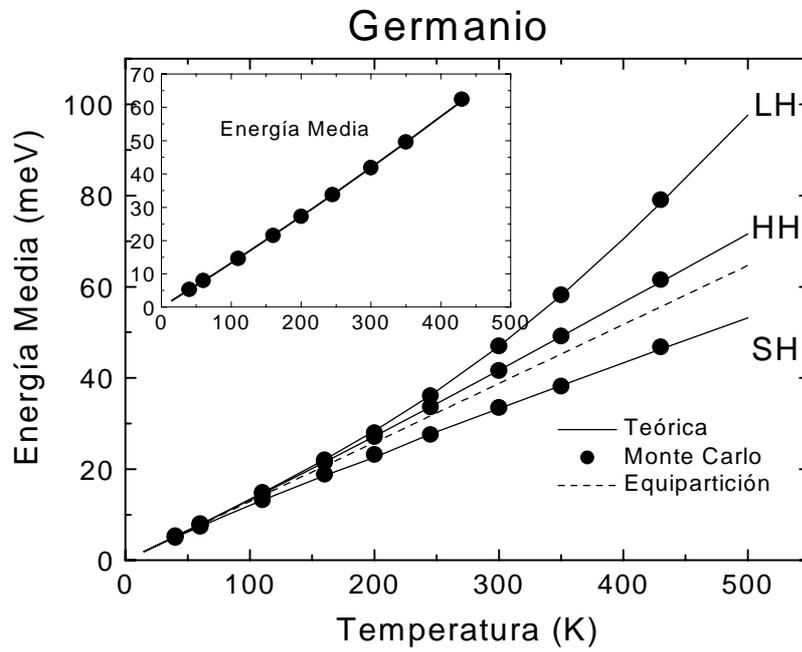
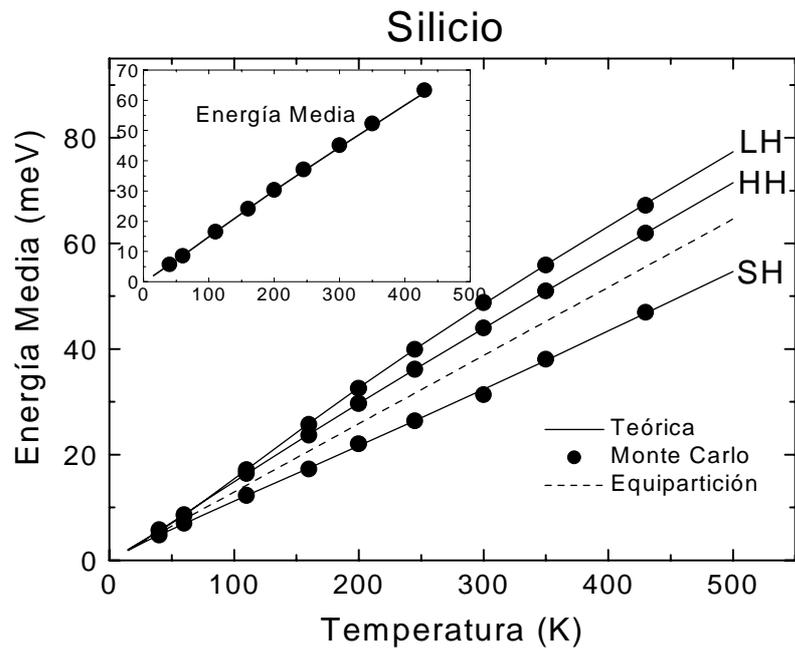


Figura 2.10: Energía media de cada uno de los tres tipos de huecos en Si y Ge en función de la temperatura. Se ha representado la energía media según el principio de equipartición. En el detalle se ha representado la energía media de todo el gas de huecos en equilibrio en función de la temperatura.

Energía media del gas de huecos bajo la acción única del scattering con fonones ópticos

Los fonones ópticos del Si y del Ge tienen una energía muy alta, y por tanto las absorciones y emisiones de fonones dan lugar a grandes cambios en la energía del hueco durante la simulación. Como se ha indicado, cada mecanismo de *scattering* actuando por separado debe dar lugar a los resultados teóricos de energía media y población de las bandas, pero esta comprobación no se puede hacer directamente para los fonones ópticos usando un simulador Monte Carlo. El principal inconveniente que se encuentra es que la energía del portador experimenta variaciones en saltos de energía $\hbar\omega_{op}$, existiendo tan solo un conjunto discreto de valores de energía permitidos muy separados entre sí, y que dependerán fuertemente del valor inicial que se le asigne al portador. Baste un sencillo ejemplo para comprender esta dependencia: ya que la energía de los fonones ópticos en Si que se ha usado en este trabajo es de aproximadamente 63 meV (ver Tabla 2.1), si seleccionásemos al comienzo de la simulación una energía inicial del hueco de 60 meV sería imposible obtener un valor medio de energía a lo largo de toda la simulación menor de 60 meV, ya que la tasa de emisión de fonones ópticos a energías menores que $\hbar\omega_{op}$ es nula, incluso cuando la energía media teórica del gas de huecos sea de tan solo unos pocos meV. Por consiguiente, la comprobación de la idoneidad del modelo de fonones ópticos que se ha usado en este trabajo no podrá hacerse directamente con el simulador Monte Carlo.

No obstante, hemos ideado el siguiente método para superar este inconveniente y comprobar si, en efecto, el modelo de *scattering* con fonones ópticos es capaz de describir correctamente el comportamiento físico del cristal en equilibrio. Si imaginamos un gas de huecos con una función de distribución inicial de equilibrio $f(\varepsilon)$, función que se estimará teóricamente, sometido únicamente al *scattering* con fonones ópticos, los huecos que tuviesen inicialmente una cierta energía ε_1 evolucionarán a lo largo del tiempo moviéndose entre los niveles de energía permitidos por las transiciones de saltos de energía $\hbar\omega_{op}$, y si se calcula la energía media de estos huecos a lo largo de la simulación encontraremos un valor $\overline{\varepsilon}_T(\varepsilon_1)$. De igual manera sucederá para cualquier otra energía inicial ε_i , que nos dará

una energía media $\bar{\varepsilon}_T(\varepsilon_i)$. Por tanto, es posible calcular numéricamente usando el simulador Monte Carlo la función $\bar{\varepsilon}_T(\varepsilon_{inicial})$ que relacione la energía inicial que se le asigna al hueco con la energía media del hueco al cabo de varios miles de *scatterings* para la temperatura de estudio cuando se considera como único mecanismo de *scattering* el de fonones ópticos, y posteriormente, considerando la función de distribución de equilibrio $f(\varepsilon)$, se estimará el valor de la energía media del gas de portadores a partir de la expresión

$$\langle \varepsilon(T) \rangle = \int_0^{\infty} \bar{\varepsilon}_T(\varepsilon_{inicial}) f(\varepsilon_{inicial}) d\varepsilon_{inicial} \quad (2.93)$$

De esta forma este método dará resultados de energía media del gas de huecos en equilibrio mezclando resultados teóricos, a través del cálculo de $f(\varepsilon_{inicial})$, con resultados que da el simulador para el *scattering* con fonones ópticos, a través del cálculo de $\bar{\varepsilon}_T(\varepsilon_{inicial})$.

En la Figura 2.11 se muestran las funciones $\bar{\varepsilon}_T(\varepsilon_{inicial})$ calculadas numéricamente para 110 K, 300 K y 430 K para un gas constituido únicamente por huecos pesados que sufre *scattering* intrabanda con fonones ópticos en Si. Además, se representa en la figura la función de distribución en energías teórica de dicho gas, ecuación (1.36), que se usará en el cálculo de la energía media del gas tal y como se indica en la ecuación (2.93).

Es interesante observar el comportamiento de las funciones $\bar{\varepsilon}_T(\varepsilon_{inicial})$, que se repiten periódicamente con un periodo igual a $\hbar\omega_{op}$. Se puede comprender este hecho debido a que el conjunto de energías iniciales $\varepsilon_{inicial} + n\hbar\omega_{op}$, siendo n entero y $\varepsilon_{inicial} < \hbar\omega_{op}$, comparten los mismos niveles de energía accesibles, y por tanto dan lugar al mismo valor en la función de energía media. Asimismo se observa una variación más brusca en la función $\bar{\varepsilon}_T(\varepsilon_{inicial})$ entre el fin de un periodo y el comienzo del siguiente cuanto menor es la temperatura de estudio. Merece la pena señalar que a bajas temperaturas la función $\bar{\varepsilon}_T(\varepsilon_{inicial})$ tiene un comportamiento casi proporcional a $\varepsilon_{inicial}$ cuando $\varepsilon_{inicial} < \hbar\omega_{op}$, condiciones en las que la práctica totalidad del gas tiene energías menores que $\hbar\omega_{op}$. Llevadas estas características a la ecuación (2.93) se encuentra la expresión usual de la

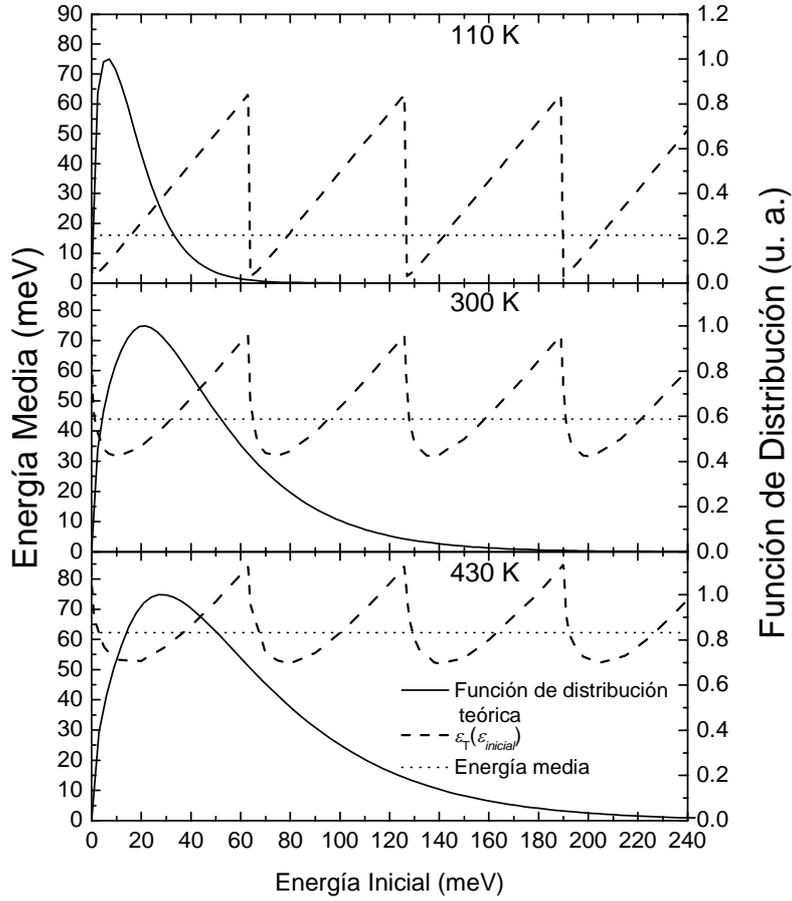


Figura 2.11: $\bar{\mathcal{E}}_T(\mathcal{E}_{inicial})$ para un gas de huecos pesados de Si obtenido por medio de simulación considerando únicamente el *scattering* con fonones ópticos HH en función de la energía inicial del hueco a 110 K, 300 K y 430 K. Se incluyen en las gráficas las funciones de distribución teóricas a estas temperaturas y las energías medias calculadas según el método expuesto. Apréciense la periodicidad de 63 meV de las funciones $\bar{\mathcal{E}}_T(\mathcal{E}_{inicial})$.

integral para calcular la energía media de un gas, hecho éste que respalda la formulación de este método.

Como ejemplo de aplicación de esta técnica, en el Si se obtuvieron energías medias de 16.11 meV, 43.95 meV y 62.24 meV a 110 K, 300 K y 430 K respectivamente al realizar las correspondientes integraciones de la (2.93) para las funciones ilustradas en la Figura 2.11. Los valores teóricos para el gas de huecos pesados son 16.38 meV, 43.96 meV y 61.95 meV a las mismas temperaturas, siendo, por consiguiente, valores muy próximos a

los que se calculan usando la técnica descrita. De hecho, las pequeñas diferencias existentes entre los resultados podrían ser atribuidas al cálculo numérico que es necesario realizar para obtener estos datos, y pensamos que cálculos mucho más refinados (que necesitarían, por tanto, tiempos de computación excesivamente largos) darían lugar a resultados de energías medias idénticos por la vía teórica y la simulación.

Asimismo, este método podría ser usado también para analizar el modelo de *scattering* con fonones acústicos desarrollado en este trabajo. Sin embargo, dicho análisis se puede realizar directamente comparando los valores teóricos con los resultados del simulador, como, en efecto, se ha observado durante el desarrollo de este estudio. Esto es así debido, fundamentalmente, a las siguientes razones:

- La función $\bar{\varepsilon}_T(\varepsilon_{inicial})$ es prácticamente independiente de la energía inicial como consecuencia de los pequeños valores de la energía media de los fonones acústicos del modelo que se usa en este trabajo (solo unos pocos meV).
- El hueco puede explorar por un conjunto continuo de energías debido a la existencia de valores distintos de energía media de los fonones acústicos para cada una de las transiciones, $\langle \varepsilon_{acu} \rangle_{IF}$.

Por consiguiente, la utilidad del método expuesto en esta sección es, principalmente, la de validar el modelo de *scattering* con fonones ópticos usado en esta investigación.

2.5.4 Potenciales de Deformación en Equilibrio

Antes de finalizar este estudio de los valores de las magnitudes de un gas de huecos en el equilibrio mencionaremos un aspecto interesante que presentan estas magnitudes en función de los potenciales de deformación óptico y acústico. Como se adelantó al comienzo de la sección 2.5, algunos autores han afirmado que la elección de los valores óptimos de los potenciales de deformación D y Ξ_0 que describen la dinámica de los huecos en un amplio rango de temperaturas es única [Fischer, 2000]. No obstante, en este trabajo se demuestra que cualquier par de valores de D y Ξ_0 suministrará los resultados teóricos de las magnitudes físicas cuando se analiza un estado de equilibrio. Para ello comenzaremos

suponiendo una secuencia de n valores r_i comprendidos en el intervalo $]0, 1]$, $\{r\} = \{r_1, r_2, r_3, \dots, r_n\}$ que tomaremos como la lista de números “aleatorios” que se irán tomando durante el cálculo Monte Carlo. En estas condiciones cabe observar que el cociente D/Ξ_0 determina la secuencia de eventos de *scattering*. Para comprender esta afirmación, imaginemos dos simulaciones que difieran únicamente en el valor de los potenciales, aunque para ambas el cociente D/Ξ_0 será igual. Al tener valores distintos de los potenciales de deformación, en general tendrán dos valores diferentes de Γ , y por consiguiente las duraciones de los vuelos libres serán distintas en una simulación y otra, aunque serán directamente proporcionales entre sí puesto que son obtenidas usando los mismos valores r . Por otro lado, la determinación de qué mecanismo de *scattering* actúa en cada momento es proporcional a la contribución del mismo a la Γ del problema para la energía del portador tras el arrastre. Si la razón D/Ξ_0 es idéntica en ambas simulaciones, la aplicación de la misma secuencia de números “aleatorios” $\{r\}$ proporcionará la misma secuencia de eventos de *scattering* en ambas. Por lo tanto, la única diferencia estriba en la duración de los vuelos libres en cada simulación, aunque éstos guardan una relación de proporcionalidad directa entre ambas. Puesto que cada uno de los vuelos libres representa la misma fracción de tiempo con respecto al total en ambas simulaciones, la población de las bandas, las funciones de distribución y las energías medias de ambas serán idénticas. Así pues, se puede razonar que los valores de las magnitudes en equilibrio dependen del cociente D/Ξ_0 y no de los valores concretos que tomen los potenciales de deformación. Con el objetivo de estudiar esta dependencia, llevamos a cabo simulaciones de un gas de huecos en Si a 77 K, 220 K y 430 K en equilibrio cambiando el cociente D/Ξ_0 en el rango $[10^8, 4 \times 10^{11}] \text{ m}^{-1}$, esto es, en un amplio entorno del cociente $2.92 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}$, que es el que se tiene cuando se usan los valores de los potenciales de deformación de Si que se han usado en este trabajo, recogidos en la Tabla 2.2, y observamos el valor de la energía media del gas de huecos para cada uno de los cocientes. Los resultados se muestran en la Figura 2.12. Se puede observar que no existe ninguna relación significativa entre el valor del cociente de los potenciales de deformación y la energía media que se obtiene en la simulación, y las diferencias entre los valores teóricos y obtenidos por simulación pueden atribuirse a

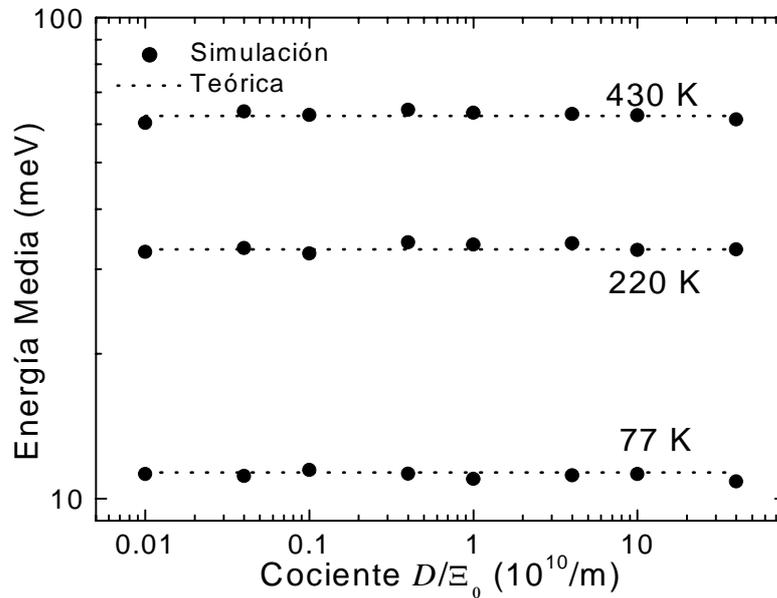


Figura 2.12: Energía media para un gas de huecos en equilibrio a 77 K, 220 K y 430 K frente al cociente D/Ξ_0 . Se ha incluido en la figura el valor teórico de la energía media calculada usando la función de distribución de la ecuación (1.36) para comparar.

fluctuaciones estadísticas del método Monte Carlo. Por tanto, a partir de este estudio se puede afirmar que:

- La obtención de un mismo valor de la energía media independientemente del cociente D/Ξ_0 es un indicio de que el estado de equilibrio al que nos llevan los mecanismos de *scattering* es independiente de los valores de D y Ξ_0 .
- Dicho estado de equilibrio coincide, al menos en su valor de energía media, con el teórico.
- Las anteriores conclusiones contemplan también la posibilidad de $\Xi_0 = 0$, $D \neq 0$ (sólo *scattering* óptico) y $D = 0$, $\Xi_0 \neq 0$ (sólo *scattering* acústico) como una forma de alcanzar el estado de equilibrio teórico. Por tanto, el estudio que se ha llevado a cabo sobre la capacidad del modelo de *scattering* con fonones ópticos de llevar al gas de huecos al equilibrio teórico, demostrado a través del método propuesto en la sección 2.5.3, queda justificado desde un nuevo punto de vista.

2.5.5 Conclusiones

Los cálculos realizados en este apartado demuestran que unos modelos de *scattering* desarrollados adecuadamente teniendo en cuenta las características de la banda dan lugar a los resultados teóricos que se deduzcan de ésta para el equilibrio. Por tanto, una buena comprobación para investigar la idoneidad de un cierto modelo de *scattering* es el estudio del estado de equilibrio al que nos lleva el mismo. Los modelos de *scattering* con fonones que se han desarrollado en este trabajo han superado dicha comprobación con éxito. Si bien es cierto que este estudio no es suficiente para garantizar que los modelos de *scattering* sean los adecuados para el estudio fuera del equilibrio, como es el caso cuando se aplica un campo eléctrico externo, sí que es un aspecto que es necesario comprobar que se cumple antes de proseguir con el desarrollo del simulador.

2.6 Resultados

En los anteriores apartados se ha presentado los modelos de las bandas de valencia de Si y Ge y las tasas de *scattering* con fonones ópticos, acústicos e impurezas ionizadas necesarias para la simulación del transporte de huecos en cristales puros o dopados de estos semiconductores. Con esto es posible implementar un simulador con el que se pueden obtener resultados de magnitudes tales como la velocidad de arrastre, la energía media o la población de las bandas frente al campo eléctrico aplicado. Además, también podemos estimar los valores de las movilidades óhmicas observando la relación entre la velocidad de arrastre y el campo eléctrico aplicado a bajos campos.

En primer lugar, y puesto que se pretende hacer un estudio fuera del equilibrio, resulta esencial determinar qué valores de los potenciales de deformación D y Ξ_0 son los adecuados. Una vez que se hayan determinado éstos, podemos llevar a cabo cualquier simulación fuera del equilibrio obteniendo resultados fiables de las distintas magnitudes. De acuerdo con el razonamiento de Fischer *et al* [Fischer, 2000] es posible obtener los

valores adecuados de los potenciales de deformación encontrando el valor de Ξ_0 que ajuste la velocidad de arrastre frente al campo eléctrico a 77 K para bajos campos, donde el *scattering* con fonones ópticos es despreciable, y una vez conocido éste, se estima el valor de D ajustando la velocidad de arrastre frente al campo eléctrico a 300 K para bajos campos. Siguiendo un procedimiento análogo a éste obtuvimos los valores de los potenciales de deformación modificados D^* y Ξ_0^* de las ecuaciones (2.35), (2.36), (2.37), (2.59), (2.60) y (2.61) que proporcionaban el mejor acuerdo entre los resultados del simulador y los datos experimentales de velocidad de arrastre frente a campo eléctrico. Los resultados de este ajuste se recogen en la Tabla 2.2. Los valores de los potenciales de deformación D y Ξ_0 pueden obtenerse a partir de los mismos multiplicándolos por $\sqrt{2}$.

En las primeras etapas del desarrollo de este trabajo se realizaron simulaciones usando el modelo de banda de valencia basado en las funciones $\chi(\varepsilon)$ numéricas, y una vez que éstas fueron parametrizadas, se utilizaron las funciones $\chi(\varepsilon)$ analíticas. La principal diferencia entre el uso de las funciones $\chi(\varepsilon)$ numéricas y analíticas es el tiempo de computación necesario para obtener resultados. Por este motivo se indicarán valores típicos de tiempo de cálculo para establecer la comparación.

2.6.1 Resultados obtenidos usando las funciones $\chi(\varepsilon)$ numéricas

En este apartado se presentan los resultados que se han obtenido sobre la velocidad de arrastre, la población de las bandas y la energía media de los huecos en función del campo eléctrico aplicado usando las funciones $\chi(\varepsilon)$ numéricas [Rodríguez-Bolívar, 2005a].

Velocidad de arrastre frente al campo eléctrico aplicado

En la Figura 2.13 se muestran los resultados de velocidad de arrastre frente al campo eléctrico aplicado en las direcciones $\langle 100 \rangle$ y $\langle 111 \rangle$ en Si y Ge para varios valores de la

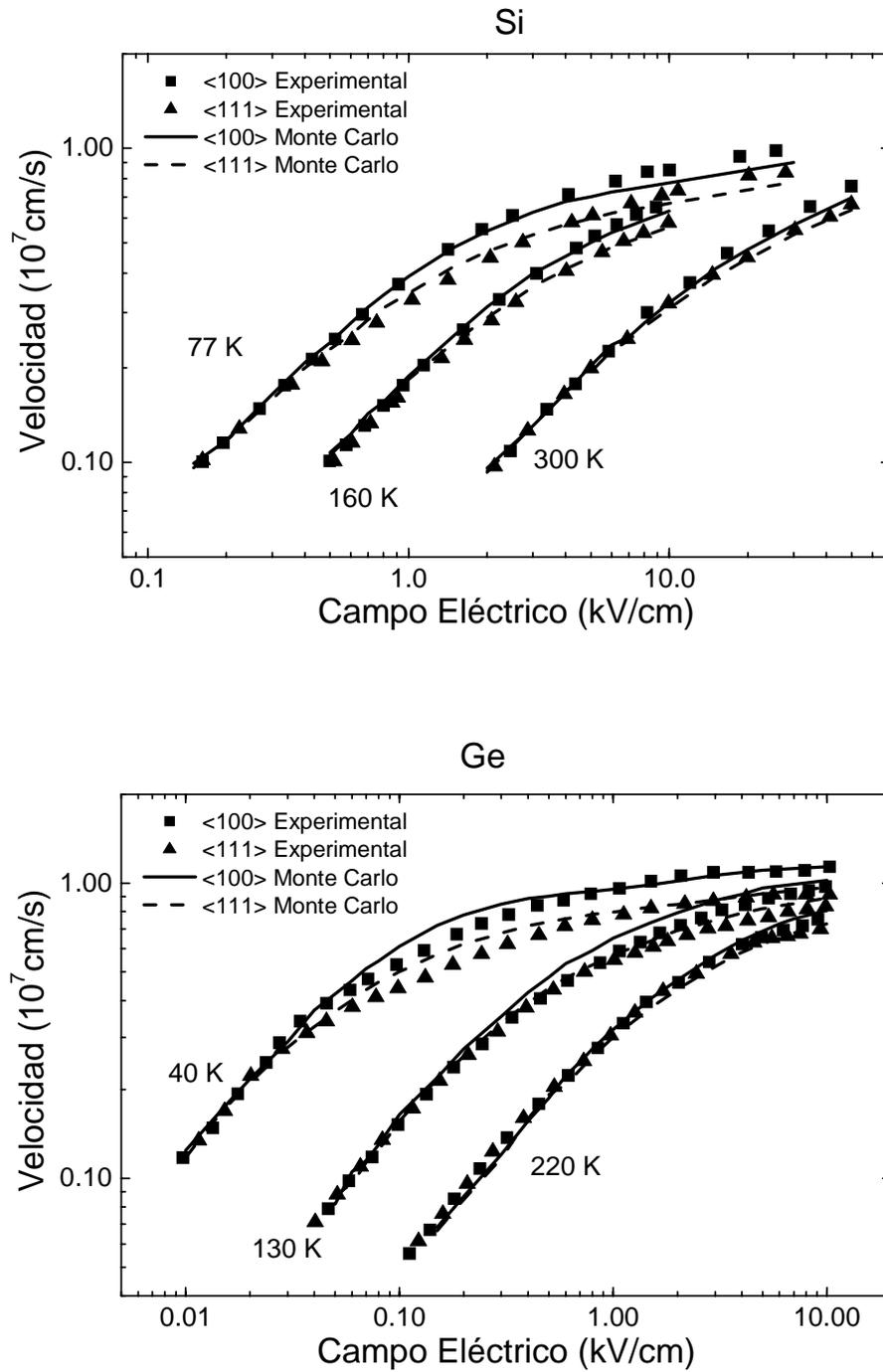


Figura 2.13: Comparación entre los datos experimentales y los resultados obtenidos con el simulador Monte Carlo de velocidad de arrastre frente al campo eléctrico aplicado para Si (panel superior) y Ge (panel inferior). Los símbolos representan los datos experimentales de Si [Ottaviani, 1975] y Ge [Reggiani, 1977] mientras que las curvas son los resultados de este trabajo.

temperatura que se obtuvieron con el simulador Monte Carlo usando los potenciales de deformación de la Tabla 2.2 comparándolos con los resultados experimentales publicados [Ottaviani, 1975], [Reggiani, 1977]. Se observa un buen acuerdo con los datos experimentales en el rango de campos eléctricos y temperaturas estudiado.

Además, se observa que el modelo de la banda de valencia y las tasas de *scattering* con fonones desarrolladas en este trabajo son capaces de describir la diferencia entre la velocidad de arrastre de los huecos en la dirección [100] y [111] a altos campos dada por los datos experimentales. En principio este comportamiento puede explicarse por la diferencia de las masas efectivas en estas direcciones de la banda más poblada, la de huecos pesados, ya que éstos presentan un valor mayor de esta magnitud en la dirección [111] que en la dirección [100]. No obstante se verá en el apartado de estudio de la población de las bandas de esta misma sección que existen otros factores que propician que se dé esta diferencia.

Con respecto al tiempo de computación, el modelo permite obtener resultados de velocidad de arrastre en tiempos del orden de los minutos. En la Tabla 2.3 se recogen los tiempos de cálculo en simulaciones de Si y Ge a 77 K y 300 K para tres valores diferentes del campo eléctrico. Con el propósito de ilustrar la precisión de los resultados obtenidos en estas simulaciones se indica el error relativo de los datos. Se realizaron cinco simulaciones en cada caso para obtener un valor medio de la velocidad de arrastre y la desviación típica de los cinco resultados. El error relativo es el cociente entre la desviación típica y el valor medio de la velocidad. Se puede observar que en la mayoría de los casos el error está por debajo del 1%.

| | | Si | | | | Ge | | | |
|--------------------------------|--------------------------|--------------------|--------------------------|--------------------|--------------------------|--------------------|--------------------------|--------------------|--|
| | | 77 K | | 300 K | | 77 K | | 300 K | |
| Campo Eléctrico (kV/cm) | Tiempo de Simulación (s) | Error Relativo (%) | Tiempo de Simulación (s) | Error Relativo (%) | Tiempo de Simulación (s) | Error Relativo (%) | Tiempo de Simulación (s) | Error Relativo (%) | |
| 0.3 | ≈160 | 0.70 | ≈116 | 9.44 | ≈95 | 0.27 | ≈125 | 3.89 | |
| 3 | ≈90 | 0.37 | ≈33 | 2.38 | ≈33 | 0.32 | ≈44 | 1.28 | |
| 30 | ≈39 | 0.26 | ≈28 | 0.76 | ≈22 | 0.42 | ≈23 | 0.93 | |

Tabla 2.3: Ejemplos de tiempos de cálculo usando un ordenador portátil con procesador Pentium 4 de 3.06 GHz, y 552 Mb de memoria RAM DDR. Los errores relativos se refieren a los datos de velocidad de arrastre.

Población de las bandas frente al campo eléctrico aplicado

En secciones anteriores se ha estimado la población de las bandas de huecos pesados, ligeros y *split-off* en equilibrio a través de cálculos teóricos, y se ha comprobado que éstas son también obtenidas por medio de simulaciones. Cuando se aplica un campo eléctrico al gas de portadores se rompe el equilibrio, siendo entonces especialmente útil el simulador Monte Carlo desarrollado en este trabajo para estimar la población de las bandas. En la Figura 2.14 se muestran las poblaciones relativas de cada una de las bandas en función del campo eléctrico para Si a 77 K y 300 K y para Ge a 40 K y 220 K. Los resultados indican que a bajos campos no existe dependencia entre las poblaciones de cada banda con la dirección de aplicación del campo. Este hecho es coherente con los estudios que se hicieron en equilibrio, ya que para un campo cero no tiene significado alguno la dirección de aplicación del mismo, y por tanto los resultados que se dieron en equilibrio eran independientes de la dirección. Cuando se aumenta el valor del campo eléctrico en Si a 77 K surgen las primeras diferencias dependientes de la dirección. Para campos mayores que 0.2 kV/cm se puede observar que la población de la banda de huecos pesados es mayor cuando el campo se aplica en la dirección [111] que cuando se aplica en la dirección [100]. Además, existe un máximo de población de la banda de huecos pesados en torno a 7 kV/cm tanto en el caso [111] como en el [100], que se corresponde directamente con un mínimo de población de la banda de huecos ligeros en las mismas circunstancias. Para campos

mayores la población de la banda de huecos pesados decrece y los portadores comienzan a llenar las bandas de huecos ligeros y *split-off*. A 300 K la influencia de la dirección de aplicación del campo eléctrico en la población de las bandas se manifiesta para campos mayores de 10 kV/cm, y no es tan significativa como a 77 K. Se puede advertir que en estas condiciones la población de la banda de huecos pesados se incrementa ligeramente, mientras que se experimenta una disminución de población en la banda de huecos ligeros. La población relativa de la banda de *split-off* permanece prácticamente independiente de la dirección de aplicación del campo y de la intensidad de éste.

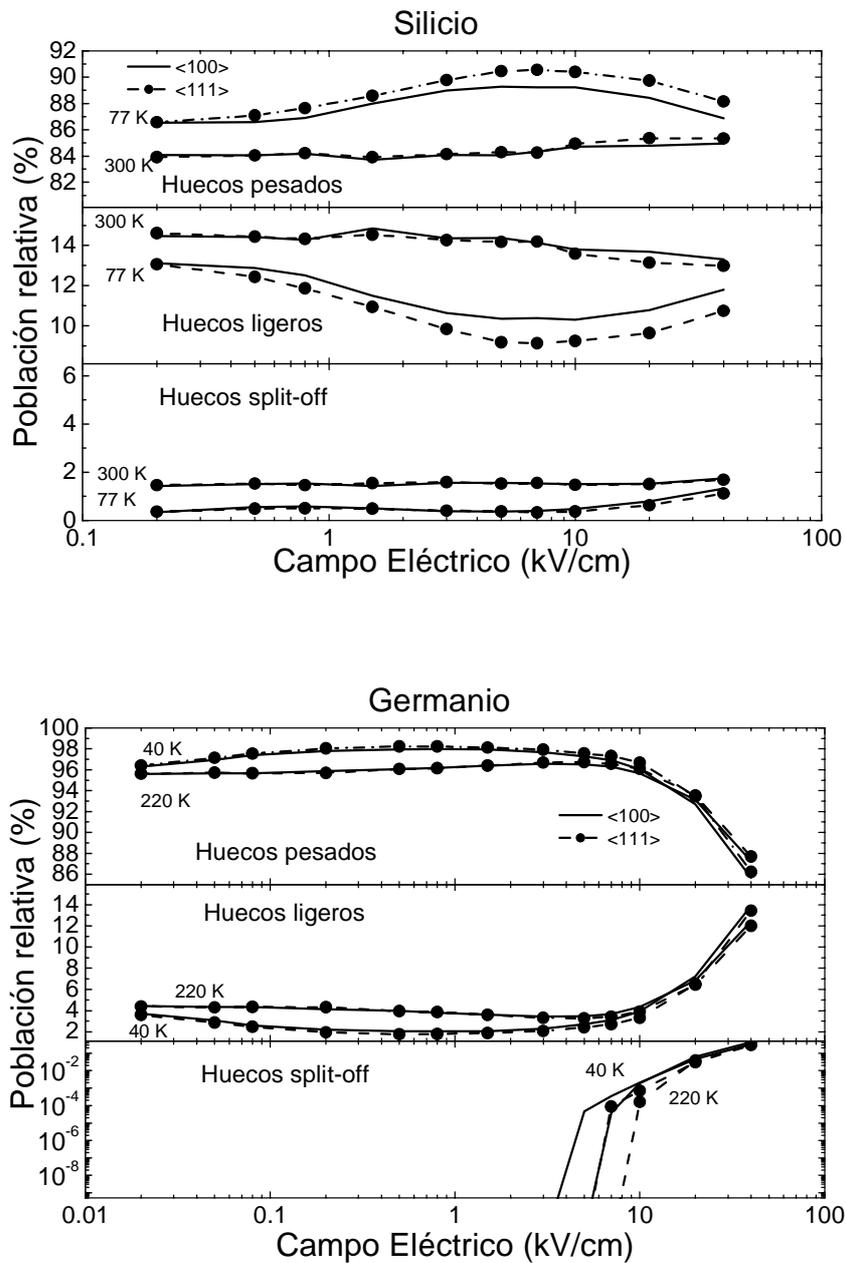


Figura 2.14: Población relativa de las bandas frente al campo eléctrico aplicado para Si a 77 K y 300 K (panel superior) y para Ge a 40 K y 220 K (panel inferior)

Para el Ge no se observa una influencia importante de la dirección de aplicación del campo eléctrico sobre la población de las bandas. Únicamente cabe hablar de una leve diferencia a 40 K de aproximadamente un 0.5% para los huecos pesados a partir de 0.02 kV/cm, y al igual que en el caso del Si consiste en una mayor población relativa de éstos

cuando el campo se aplica en la dirección [111] que cuando se hace en la dirección [100]. Para 220 K también puede observarse una leve diferencia en la población relativa de las bandas de aproximadamente 0.25% para campos superiores a 10 kV/cm, encontrándose que la banda de huecos pesados se halla ligeramente más poblada cuando el campo tiene dirección [111] que cuando tiene dirección [100]. Las diferencias a campos más pequeños pueden atribuirse a errores estadísticos. Para campos mayores de 6 kV/cm la población de la banda de huecos pesados decrece de manera importante, y los huecos tienden a ocupar la banda de huecos ligeros y, en mucha menor medida, la de *split-off*. De hecho esta última seguirá estando prácticamente vacía, ya que en el mejor de los casos sólo el 0.5% del total de huecos la ocuparán.

Estos resultados sugieren una causa más por la que la velocidad de arrastre a altos campos es menor cuando el campo tiene la dirección [111] que cuando está orientado en la dirección [100], ya que cuando el campo tiene la dirección [111] la población de la banda de huecos pesados aumenta, y por consiguiente la velocidad de arrastre del gas de portadores se hará menor al haber más huecos pesados en él.

Energía media del gas de huecos frente al campo eléctrico aplicado

Otra magnitud interesante fuera del equilibrio es la energía media del gas de huecos. Cuando se aplica un campo eléctrico, la energía media de los huecos tiende a crecer. Este fenómeno ha sido ya estudiado por medio de simulaciones basadas en el método del pseudopotencial [Nguyen, 2002], [Nguyen, 2003], lo que nos permite comparar los resultados que proporciona nuestro método con los de éste.

La Figura 2.15 muestra la dependencia de la energía media del gas de huecos frente al valor del campo eléctrico aplicado en la dirección $\langle 111 \rangle$ para 77 K, 300 K y 430 K en Si y para 77 K, 130 K, 190 K y 300 K para Ge. La figura muestra un buen acuerdo entre los resultados del modelo desarrollado en este trabajo y los que proporciona el método del Pseudopotencial de Nguyen *et al.*, en especial para el Ge, en el que los resultados son muy similares. En Si se observa un fuerte calentamiento de los portadores en torno a 0.1 kV/cm en la curva correspondiente a 77 K mayor que el observado en los resultados de Nguyen *et*

al. Este comportamiento se puede explicar de la siguiente manera: el mecanismo de *scattering* que predomina a bajas temperaturas es el de fonones acústicos, el cual puede disipar energía a un ritmo lento debido a la baja energía de éstos. Por este motivo, un incremento del campo eléctrico aumenta rápidamente la energía media de los portadores

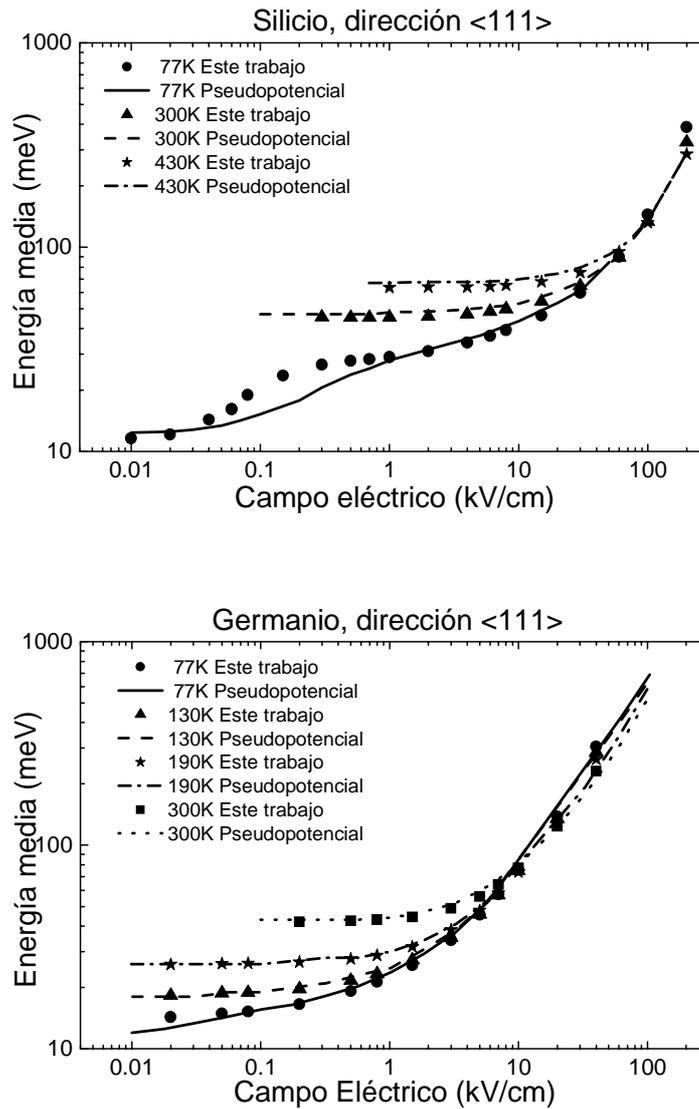


Figura 2.15: Comparación entre la energía media del gas de huecos frente al campo eléctrico aplicado en la dirección <111> obtenida en este trabajo y la obtenida por el método del pseudopotencial [Nguyen, 2003] para Si y Ge a varias temperaturas. En Si a 77 K el modelo desarrollado en este trabajo muestra un calentamiento más acusado que el pseudopotencial para campos próximos a 0.1 kV/cm. Para Ge los resultados de ambos métodos son prácticamente iguales.

hasta que el gas adquiere energías suficientemente altas y comienza a ser importante el mecanismo de *scattering* de fonones ópticos. Éstos, al ser mucho más energéticos, atenúan este calentamiento, y la energía media deja de aumentar aunque se incremente el valor del campo eléctrico. Finalmente, cuando éste es suficientemente intenso, la emisión de fonones ópticos deja de ser suficiente para mantener el mismo valor de la energía media y ésta se incrementa al igual que sucede a altas temperaturas. Por consiguiente resulta razonable que sean los valores de los potenciales de deformación los que marquen en qué punto comienza el *scattering* con fonones ópticos a ser relevante y, por tanto, para qué valor del campo eléctrico se observará el comportamiento de fuerte calentamiento seguido de una región de energía media casi constante.

Los valores de los potenciales de deformación que se han usado en las simulaciones de Nguyen *et al.* [Nguyen, 2003] fueron de $\Xi_0 = 5.55$ eV y $D = 9.0 \times 10^{10}$ eV/m, en comparación con $\Xi_0 = 4.45$ eV y $D = 13.1 \times 10^{10}$ eV/m que son los usados en este trabajo. De esta forma, en nuestro trabajo atribuimos una mayor importancia al *scattering* con fonones ópticos al asignarle, en proporción, un mayor valor del potencial de deformación, lo que provoca que este mecanismo aparezca a campos más bajos y con una mayor intensidad en nuestros resultados. Además, la mayor relevancia del *scattering* con fonones acústicos en los trabajos de Nguyen *et al.* podría ser responsable de que el aumento de la energía con el campo eléctrico a bajos campos sea más suave que el de nuestros resultados.

2.6.2 Resultados obtenidos usando las funciones $\chi(\varepsilon)$ analíticas

En este apartado se mostrarán los resultados que se obtuvieron durante el desarrollo de esta investigación empleando el modelo analítico de banda de valencia. En primer lugar se representan las curvas de velocidad de arrastre frente a campo eléctrico para Si y Ge, que permiten comparar los resultados que proporciona este modelo y el numérico. Seguidamente indicaremos los tiempos de cálculo que son necesarios para obtener

resultados con el simulador Monte Carlo cuando se emplea el modelo analítico, con el fin de que queden patentes sus ventajas, y finalmente se muestran resultados relacionados con el cálculo de movilidades, tanto en semiconductores puros como en semiconductores dopados con distintas concentraciones de impurezas.

Velocidad de arrastre frente al campo eléctrico aplicado

Las curvas de la Figura 2.16 [Rodríguez-Bolívar, 2005b] muestran un buen acuerdo con los datos experimentales, igual que se observaba en la Figura 2.13 usando el modelo numérico, lo que prueba que la parametrización de las funciones $\chi(\varepsilon)$ fue realizada adecuadamente, ya que ni la dinámica del portador durante el vuelo libre ni las probabilidades de *scattering*, relacionadas con $\mathfrak{S}(\varepsilon)$, han sufrido cambios apreciables al usar un modelo u otro.

En la Tabla 2.4 se muestran los resultados de tiempo de cálculo obtenidos con la variante analítica del modelo de banda de valencia siguiendo el mismo procedimiento con el que se obtuvieron los resultados de la Tabla 2.3. Comparando con los datos de ésta última podemos observar que en muchos casos el tiempo de computación para cálculos cuyo error relativo es del mismo orden se reduce en más de la mitad. En ninguno de ellos el tiempo de cálculo superó el minuto, obteniéndose en la simulación resultados aceptables con errores relativos pequeños.

| Campo Eléctrico (kV/cm) | Si | | | | Ge | | | |
|--------------------------------|--------------------------|--------------------|--------------------------|--------------------|--------------------------|--------------------|--------------------------|--------------------|
| | 77 K | | 300 K | | 77 K | | 300 K | |
| | Tiempo de Simulación (s) | Error Relativo (%) | Tiempo de Simulación (s) | Error Relativo (%) | Tiempo de Simulación (s) | Error Relativo (%) | Tiempo de Simulación (s) | Error Relativo (%) |
| 0.3 | ≈60 | 1.02 | ≈60 | 9.77 | ≈53 | 0.21 | ≈53 | 4.11 |
| 3 | ≈43 | 0.31 | ≈20 | 2.60 | ≈21 | 0.22 | ≈18 | 1.23 |
| 30 | ≈25 | 0.23 | ≈17 | 0.45 | ≈21 | 0.31 | ≈24 | 1.05 |

Tabla 2.4: Ejemplos de tiempos de cálculo usando un ordenador portátil con procesador Pentium 4 de 3.06 GHz, y 552 Mb de memoria RAM DDR. Los errores relativos se refieren a los datos de velocidad de arrastre.

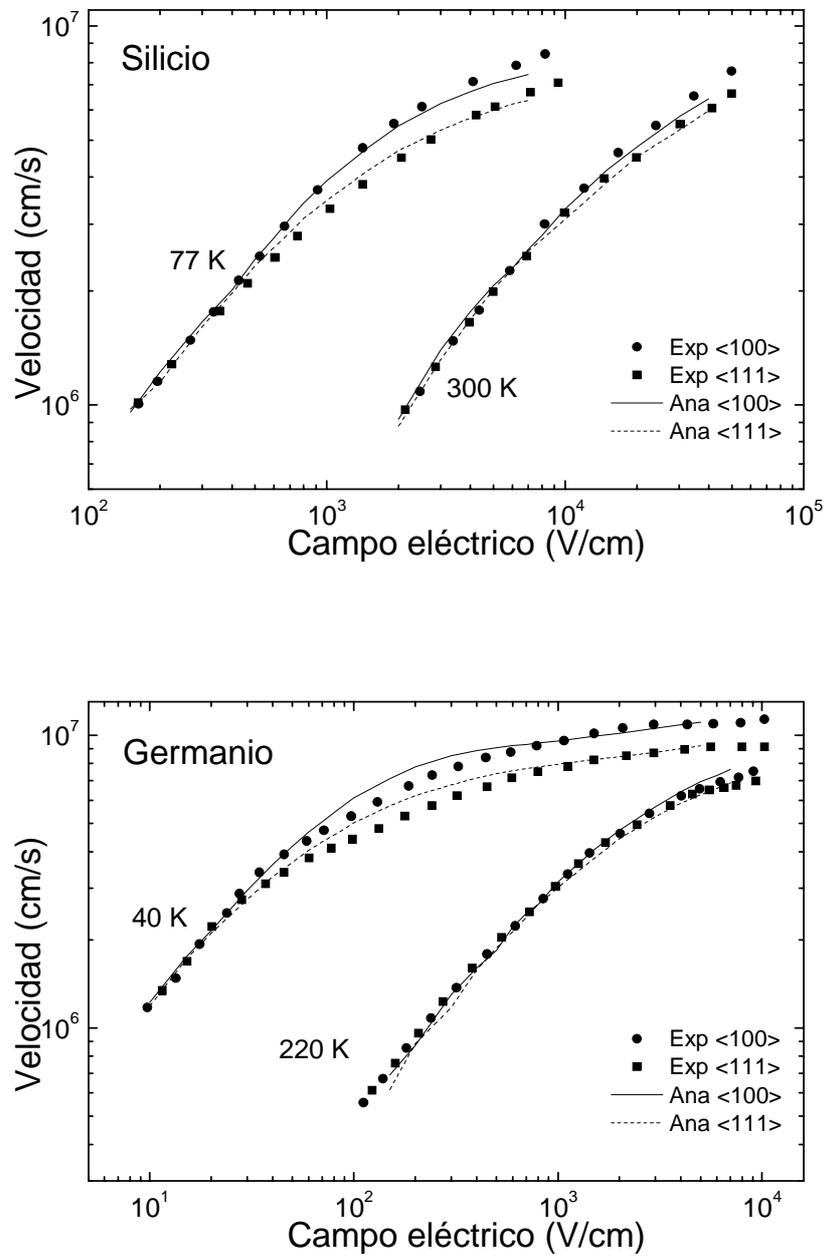


Figura 2.16: Comparación entre los datos experimentales y los resultados obtenidos con el simulador Monte Carlo de velocidad de arrastre frente al campo eléctrico aplicado para Si (panel superior) y Ge (panel inferior). Los símbolos representan los datos experimentales de Si [Ottaviani, 1978] y Ge [Reggiani, 1977] mientras que las líneas son los resultados de este trabajo usando el modelo analítico de banda de valencia.

Movilidades óhmicas

Para valores muy pequeños del campo eléctrico, la velocidad de arrastre es aproximadamente proporcional a la intensidad del campo, $v_d = \mu_{Ohm} |\vec{E}|$. La constante de proporcionalidad que los relaciona, μ_{Ohm} , se conoce como *movilidad óhmica* de los portadores. Esta magnitud tiene una importancia fundamental en el desarrollo de un simulador de dispositivos, ya que influye directamente sobre el valor de la corriente que circula por ellos [Roldán, 1997].

Al ser una magnitud física de tipo macroscópico, se puede medir experimentalmente en muestras de cristales y comparar con los resultados suministrados por el simulador. En principio esta comparación puede resultar muy útil para confirmar que el simulador se ha implementado adecuadamente, y posteriormente se puede emplear éste para predecir valores de la movilidad óhmica en otras condiciones en las que ésta no ha sido medida. No obstante, a lo largo de este estudio se ha observado la dificultad que entraña la determinación de la movilidad óhmica usando un simulador Monte Carlo, que proporciona unos resultados en los que siempre existe una dispersión inherente a los procesos aleatorios que se simulan, mucho más grande cuanto menor es el valor del campo eléctrico aplicado como consecuencia del dominio de los mecanismos de *scattering* sobre el arrastre en la dinámica del portador. Además, el rango de campos eléctricos que se ha empleado para determinar experimentalmente la movilidad óhmica no siempre se hace explícito en los trabajos en los que se detallan los valores obtenidos de esta magnitud, por lo que no se puede afirmar con certeza si el simulador suministra los valores correctos o no cuando éstos no coinciden con los experimentales.

Por ello, a lo largo de este trabajo hemos usado varios métodos de cálculo de la movilidad óhmica que describiremos a continuación con las ventajas e inconvenientes que hemos encontrado.

En primer lugar se usó el método de extrapolación. Éste consiste en suponer la forma de la relación $v_d(|\vec{E}_d|)$ en un amplio rango de campos (en función de una serie de parámetros ajustables). Éstos pueden encontrarse a partir de los resultados de simulaciones a campos medios y altos, y una vez determinados los parámetros, la movilidad óhmica se deducirá de

la pendiente en el origen de la relación teórica $v_d(|\vec{E}_d|)$. La principal ventaja de este método es la rapidez con la que se puede determinar la movilidad óhmica, ya que por lo general la velocidad de arrastre puede determinarse con bastante precisión para campos medios y altos con sólo unos minutos de cálculo. Este método ha sido usado con éxito en electrones por otros autores [Gámiz, 1994].

Sin embargo, nuestra experiencia sugiere que este procedimiento puede presentar inconvenientes. El principal de ellos es la dificultad que entraña proponer un modelo que reproduzca adecuadamente el comportamiento de la relación $v_d(|\vec{E}_d|)$ en un amplio rango de campos eléctricos en cristales de diferentes materiales semiconductores, a diferentes temperaturas, con distintos niveles de dopado y válido para electrones y huecos. Con estas consideraciones lo más razonable es formular un modelo de relación $v_d(|\vec{E}_d|)$ que sea aplicable dentro de unos rangos de validez de temperaturas, dopado y tipo de portador más o menos estrictos. No obstante, sería deseable que el rango de validez de campos eléctricos sí se extendiera hasta grandes campos, ya que en caso contrario las ventajas que el método de extrapolación ofrece no serían aprovechadas y el cálculo de la movilidad óhmica podría realizarse por métodos más sencillos, aunque necesitándose mayores tiempos de cálculo. La inadecuación de un cierto modelo a un caso particular se manifestaría como un comportamiento inestable, de forma que al añadir más puntos al ajuste, los parámetros del modelo variarían significativamente, no pudiendo garantizarse así que éste esté proporcionando resultados fiables.

Aquí se usaron dos modelos de ajuste diferentes para aplicar el método de la extrapolación [Gámiz, 1994]

$$v_d = \mu_{Ohm} |\vec{E}_d| \times [1 + \alpha |\vec{E}_d|] \quad (2.94)$$

y

$$v_d = \frac{\mu_{Ohm} |\vec{E}_d|}{1 + \beta |\vec{E}_d|} \quad (2.95)$$

Con ellos pudimos efectuar estimaciones de los valores de la movilidad óhmica en semiconductores de Si y Ge puros que estuvieron en muchos casos en buen acuerdo con los

resultados experimentales y con resultados de otros autores. No obstante, se observaron inestabilidades del tipo indicado anteriormente que hacen pensar que los modelos anteriores no son del todo adecuados a la descripción de la relación $v_d(|\vec{E}_d|)$ para los huecos en Si y Ge a 77 K y 300 K. Así pues deberían usarse modelos más complejos para el estudio de éste tipo de portadores.

En segundo lugar, en este trabajo también se usó el método del ajuste lineal por la técnica de mínimos cuadrados. La velocidad de cálculo que se obtiene mediante el uso del modelo analítico de la banda de valencia permitió estimar la movilidad óhmica de los huecos por este procedimiento necesitándose relativamente poco tiempo de computación. La Tabla 2.5 muestra los valores de la movilidad óhmica que se obtuvieron en este trabajo para Si y Ge a 77 K, 130 K, 190 K y 300 K con sus correspondientes intervalos de error [Rodríguez-Bolívar, 2005b] usando este método. La tabla muestra un excelente acuerdo entre los resultados de este trabajo, los obtenidos por el método del Pseudopotencial y los datos experimentales. En el caso del Ge a 77 K el cálculo nos proporciona resultados en acuerdo con los experimentales y que mejora notablemente los valores que se obtienen con el Pseudopotencial.

La principal ventaja que hemos encontrado en este método es que tiene una estabilidad mayor cuando se aplica al cálculo de la movilidad óhmica en semiconductores puros, proporcionando resultados de movilidad similares aunque se añadan nuevos puntos al ajuste. En cambio, su desventaja es el mayor tiempo de computación necesario, ya que las simulaciones se han de efectuar a campos bajos, donde se requieren cálculos más largos

| Movilidades óhmicas de los huecos (cm ² /V s) | | | | | | |
|--|--------------|-----------------|--------------|--------------|-----------------|--------------|
| T (K) | Si | | | Ge | | |
| | Este trabajo | Pseudopotencial | Experimental | Este trabajo | Pseudopotencial | Experimental |
| 77 | 10707±934 | 12100±1090 | 11600 | 45302±1753 | 58600±1172 | 45840 |
| 130 | | | | 16798±1085 | 16420±936 | |
| 190 | | | | 6326±295 | 6010±480 | |
| 300 | 517±43 | 479±30 | 505 | 1891±100 | 1923±115 | 1900 |

Tabla 2.5: Movilidades óhmicas de los huecos calculadas en este trabajo y comparadas con los resultados de Nguyen *et al.* [Nguyen, 2003] y con los valores experimentales. Estos últimos son de [Madelung, 1991] para Si y de [Landoldt-Börnstein, 1982] para Ge

para poder obtener resultados con errores aceptables. Además, aunque tenga una estabilidad mayor que el método de la extrapolación, se puede observar que el valor de la movilidad óhmica que proporciona decrece conforme se incorporan datos de campos eléctricos más altos debido al aumento de la energía media de los portadores.

En tercer lugar se ha usado otro método basado en la definición de la movilidad óhmica que reduce los inconvenientes de la gran dispersión de los datos obtenidos en simulaciones de semiconductores impuros. Los valores de la movilidad óhmica calculados mediante la simulación del transporte de huecos en semiconductores dopados a campos muy bajos presentan dispersiones muy grandes debido al *scattering* con impurezas ionizadas. Así, el tiempo necesario para poder obtener datos con pequeños intervalos de error que permitan realizar el ajuste anterior es demasiado grande en la práctica. Por ello el método que se ha empleado en este caso es la simulación durante un tiempo largo para un único valor del campo eléctrico. Una única simulación de larga duración es capaz de dar un resultado con un intervalo de error muy pequeño, y calculando el cociente $\frac{v_d}{|\vec{E}_d|}$ se puede estimar el valor

de la movilidad óhmica con bastante precisión. Este método ya ha sido utilizado por otros autores en trabajos anteriores de tipo experimental [Ottaviani, 1975]. La cuestión importante de este método estriba en la determinación de qué valor del campo eléctrico es el adecuado para hacer estos cálculos. Para resolver esta pregunta, se puede argumentar que mientras el gas de portadores tenga una energía media aproximadamente igual a la del equilibrio, la función de distribución será aproximadamente la de equilibrio y la movilidad obtenida en estas condiciones será la óhmica. Cuando el campo eléctrico calienta el gas hasta aumentar la energía media de los portadores, la función de distribución habrá cambiado y las tasas de *scattering* que sufren los portadores cambiarán significativamente, tendiendo a saturar el valor de la velocidad de arrastre, o lo que es lo mismo, curvando la relación $v_d(|\vec{E}_d|)$ y alejándonos de la región lineal. En la Figura 2.17 se muestra el caso de Si a 77 K como ejemplo. Para campos eléctricos por debajo de 0.02 kV/cm la relación $v_d(|\vec{E}_d|)$ es aproximadamente lineal. Por encima de este rango la curva comienza a curvarse, mostrando velocidades de arrastre menores que las que se corresponderían con el comportamiento lineal de bajos campos. Comparando la Figura 2.17 con la Figura 2.15

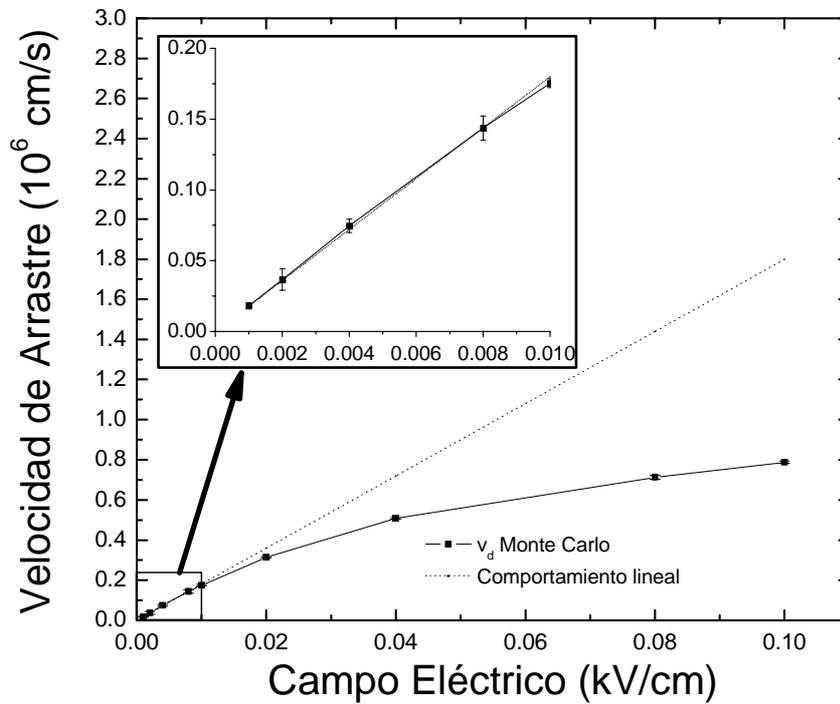


Figura 2.17: Velocidad de arrastre frente a campo eléctrico en Si a 77 K para campos muy bajos y recta que muestra el comportamiento lineal de la relación $v_d(|\vec{E}_d|)$ en el límite de campo cero. El detalle muestra sólo los datos de la región lineal.

comprobamos que existe una relación entre el calentamiento de los portadores por el campo eléctrico y el alejamiento del comportamiento lineal de la relación $v_d(|\vec{E}_d|)$. El campo eléctrico a partir del cual se puede considerar que la curva $v_d(|\vec{E}_d|)$ deja de ser una línea recta es el mayor valor que se debería usar para determinar la movilidad óhmica, tanto por la vía teórica como por la vía experimental. Sin embargo, a bajas temperaturas este valor puede ser tan pequeño que los aparatos de medida experimentales no permitan llevar a cabo la medida en la práctica, y por consiguiente los valores experimentales de la movilidad óhmica que se publican son tan sólo aproximados [Ottaviani, 1975]. Así, las diferencias observadas entre los resultados teóricos y experimentales pueden deberse al rango de campos eléctricos usados en cada estudio. Por ejemplo, este hecho puede justificar el gran

desacuerdo existente entre los resultados experimentales y teóricos de Nguyen *et al.* [Nguyen, 2003] en Ge a 77 K (Tabla 2.5).

De esta manera calculamos la movilidad óhmica en cristales de Si dopados con concentraciones de impurezas comprendidas entre 10^{15} cm^{-3} y 10^{20} cm^{-3} a 200 K, 300 K, 400 K, 500 K y 600 K y en Ge con dopados comprendidos entre 10^{13} cm^{-3} y 10^{20} cm^{-3} a 77 K y con dopados entre 10^{13} cm^{-3} y 10^{17} cm^{-3} a 300 K. Merece la pena destacar que, debido a que no todas las impurezas se encontrarán ionizadas, los valores de dopado y de concentración de impurezas ionizadas pueden diferir notablemente entre sí, así como la concentración de portadores libres que apantallarán el potencial de las impurezas. Por este motivo, para cada caso particular de semiconductor, dopado y temperatura se resolvieron las ecuaciones correspondientes para estimar el valor de estas magnitudes.

En el caso del Si usamos un campo eléctrico de 0.5 kV/cm para todas las temperaturas, excepto para 200 K, donde se utilizó 0.1 kV/cm para evitar alejarnos de la zona lineal. En la Figura 2.18 se muestran los resultados obtenidos. Las curvas experimentales que se usaron son de Dorkel y Leturcq [Dorkel, 1981], [Ioffe Institute]. Los resultados que se obtuvieron mediante el simulador se especifican con sus correspondientes intervalos de error. Para cada temperatura, cada uno de los puntos representa un dopado diez veces superior al inmediatamente anterior.

El mejor acuerdo entre los resultados del simulador y los experimentales se encuentra en la curva de 300 K hasta una concentración de impurezas ionizadas de 10^{18} cm^{-3} aproximadamente. También existe un buen acuerdo entre los resultados del simulador y los experimentales a temperaturas más altas hasta una concentración de impurezas ionizadas similar a la indicada anteriormente. No obstante, aunque los datos de 200 K que suministra el simulador siempre son mayores que los experimentales, el comportamiento decreciente de la curva sigue el mismo patrón. Merece la pena reseñar que, cuando se usó un campo de 0.5 kV/cm para realizar el cálculo, los resultados obtenidos estaban en buen acuerdo con los experimentales hasta una concentración de impurezas de unos 10^{18} cm^{-3} . No obstante, para un campo de 0.5 kV/cm los efectos del calentamiento en los portadores son ya ligeramente apreciables (la energía media para este campo es de aproximadamente 31.8 meV, mientras que la energía media a 0.1 kV/cm es de unos 30.4 meV), y por tanto no es el mejor valor para calcular la movilidad óhmica, por lo que se optó por un valor más bajo para obtener

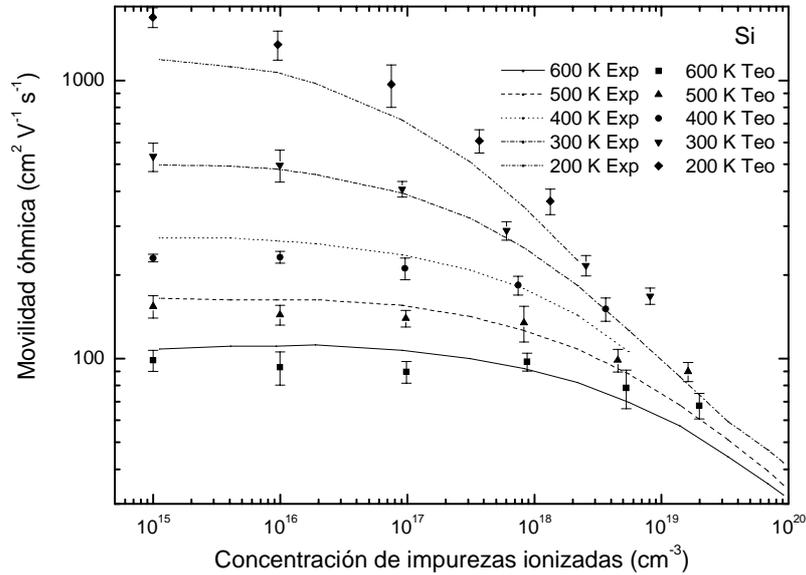


Figura 2.18: Movilidad óhmica experimental (curvas) [Dorkel, 1981] y obtenida en este trabajo (intervalos de error) en Si para el rango de temperaturas entre 200 K y 600 K frente a la concentración de impurezas ionizadas.

los datos representados en la Figura 2.18. El buen acuerdo entre los datos experimentales y los resultados de las simulaciones cuando se simuló un campo de 0.5 kV/cm se podrían atribuir a que los campos eléctricos usados en la determinación experimental de la movilidad óhmica a 200 K no fueron suficientemente bajos, y que por tanto dieron lugar a movilidades óhmicas menores que las que se encuentran en el presente estudio.

Las importantes diferencias entre los resultados teóricos y los valores experimentales para altas concentraciones de impurezas ionizadas pueden deberse a que en esas condiciones el modelo de Brooks y Herring deja de ser válido. Para altos dopados, este modelo sobreestima el apantallamiento, y por consiguiente las tasas de *scattering* con las impurezas ionizadas son menores de lo que en realidad deberían ser. Por este motivo, otros autores [Nguyen, 2003] han incluido factores multiplicativos *ad hoc* en las tasas de *scattering* para reproducir los resultados experimentales. En este trabajo se ha optado por mostrar los resultados obtenidos y de ellos extraer el rango de validez de los modelos en vez de realizar este ajuste.

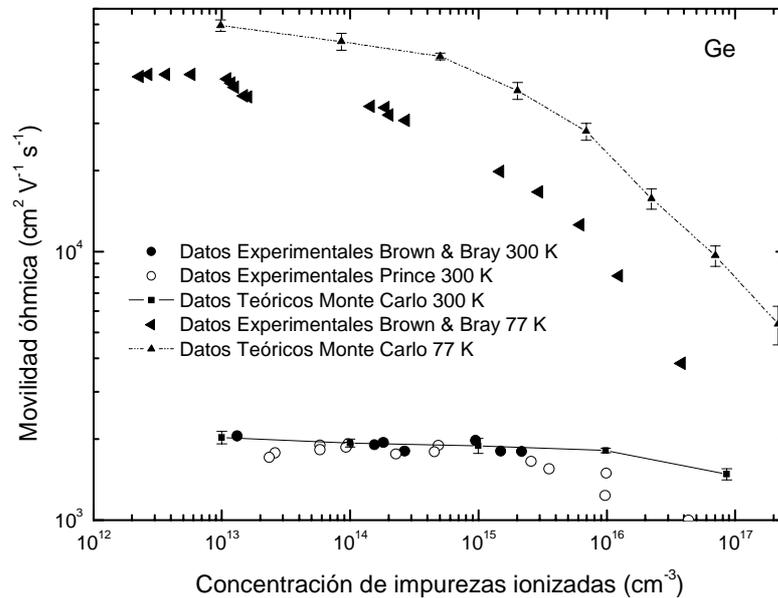


Figura 2.19: Movilidad óhmica experimental (símbolos) [Brown, 1962] [Prince, 1952] y obtenida en este trabajo (intervalos de error) en Ge para 77 K y 300 K frente a la concentración de impurezas ionizadas.

Con respecto al Ge, la Figura 2.19 muestra los resultados obtenidos mediante el simulador junto con valores experimentales [Brown, 1962], [Prince, 1953]. También en esta figura los resultados del simulador se corresponden con un dopado del cristal diez veces superior al punto anterior.

El mejor acuerdo se encuentra a 300 K hasta una concentración de impurezas ionizadas de 10^{16} cm^{-3} aproximadamente. A 77 K los resultados del simulador reproducen con gran fidelidad el comportamiento decreciente de la movilidad con el incremento de la concentración de impurezas ionizadas, aunque los valores experimentales sean notablemente menores que los que proporciona el simulador. Esta diferencia puede atribuirse a circunstancias similares a las que hacían que los datos experimentales y teóricos en Si a 200 K no concordasen. De hecho, se trata del mismo tipo de discordancia, proporcionando el simulador en ambos casos movilidades superiores a las experimentales. Por otro lado, merece la pena destacar que éste último método de cálculo de la movilidad

óhmica proporciona un resultado en Ge a 77 K próximo al que daban Nguyen *et al.*, que era discordante con el resultado experimental.

Por último, la validez del simulador para Ge parece estar restringida para concentraciones de impurezas ionizadas menores que 10^{16} cm^{-3} . Los resultados teóricos, de mayor valor que los experimentales para concentraciones por encima de esta cota, parecen también estar justificados en el caso del Ge por la sobreestimación del apantallamiento de las impurezas del formalismo de Brooks y Herring.

2.6.3 Conclusiones

El estudio que se ha realizado ha demostrado que el modelo numérico y analítico de la banda de valencia da lugar a resultados similares, validando el ajuste que se ha realizado. Además, los valores de las magnitudes físicas que se han obtenido con el simulador usando uno u otro modelo han estado en general en acuerdo con los resultados experimentales y con resultados de otros autores que emplean modelos de banda de valencia más complejos.

Por último, se ha investigado el cálculo de la movilidad óhmica usando el simulador a través de tres procedimientos de cálculo diferentes, comentándose las ventajas y desventajas que hemos encontrado en cada uno de ellos cuando se evalúa esta magnitud para los huecos en Si y Ge en amplios rangos de temperaturas y dopados. Esta investigación sugiere que el cálculo de la movilidad óhmica tanto por medio de la simulación como por medio de experimentos puede proporcionar resultados muy dispares en función de los campos que se empleen en su medida y del método de cálculo que se adopte, especialmente a bajas temperaturas donde la movilidad óhmica ha de calcularse para campos extremadamente pequeños.

Capítulo 3

Relaciones Energía-Momento y Funciones Envolventes en Pozos Cuánticos

En lo tocante a la ciencia, la autoridad de un millar no es superior al humilde razonamiento de una persona.

(Galileo Galilei)

3.1 Introducción

Los efectos cuánticos en el comportamiento físico de los portadores de los dispositivos electrónicos en los que se investiga en la actualidad cobran cada vez una mayor relevancia como consecuencia de las dimensiones nanométricas de las estructuras que los forman. Por este motivo, la simulación de estos dispositivos ha de considerar el estudio de la cuantización de los niveles de energía y la determinación de las funciones de onda de los mismos. En función de la estructura particular de cada dispositivo, los portadores se encuentran confinados en una, dos o tres dimensiones. El tratamiento matemático del problema en particular se deberá hacer, por consiguiente, siguiendo el formalismo del estudio de pozos, hilos y puntos cuánticos, respectivamente.

En particular, los dispositivos basados en la estructura MOS y en estructuras de superredes son un caso particular de confinamiento en una dirección. El gas de portadores

en las mismas debe ser estudiado, por tanto, como un sistema bidimensional, y los efectos cuánticos de este confinamiento son relevantes en la mayoría de los casos [Ando, 1982]. Por este motivo, una gran parte de los trabajos publicados en las últimas décadas sobre estos tipos de dispositivos electrónicos y nanoestructuras consideran que es fundamental un estudio cuántico para avanzar en la comprensión del comportamiento de los dispositivos [Mori, 2004], [Wu, 2003] [Gámiz, 1998] [Low, 2003] [Sano, 2002], [Fischetti, 1993], [Imanaga, 1991].

Por ello es necesario abordar el problema de la simulación considerando el planteamiento y la resolución de la ecuación de Schrödinger del sistema. Dentro del marco del Teorema de la Masa Efectiva se han realizado trabajos para resolver la ecuación de Schrödinger con distintos grados de complejidad. Con respecto a la banda de valencia cabe citar el tratamiento del problema llevado a cabo por Luttinger y Kohn [Luttinger, 1955a], que consideran en su estudio el acoplamiento de las bandas de huecos pesados, ligeros y *split-off*. Por otro lado, Stern [Stern, 1972] plantea el problema desde un punto de vista mucho más simple. En su trabajo, Stern formula la ecuación de Schrödinger de los portadores basándose en dos aproximaciones: i) la masa del portador es su masa efectiva y ii) el potencial al que están sometidos los portadores es el electrostático aplicado a la estructura. Para el caso particular de un gas bidimensional de portadores la ecuación de Schrödinger puede simplificarse notablemente al tener en cuenta que la función de onda del portador, al no estar confinado en el plano perpendicular a la dirección de confinamiento y seguir bajo la acción del potencial periódico de la red, puede ser descrita con una onda plana en dicho plano cuyo vector de onda se denominará *vector de onda paralelo*, \vec{k}_{\parallel} . Según el planteamiento de Stern, la componente de la envolvente de la función de onda en la dirección de confinamiento, $\zeta(z)$, ha de satisfacer la siguiente ecuación diferencial:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \zeta(z) + V(z)\zeta(z) = \varepsilon_z \zeta(z) \quad (3.1)$$

siendo m^* la masa efectiva del portador, $V(z)$ el potencial electrostático aplicado a la estructura y ε_z un autovalor de la ecuación diferencial relacionado con la energía del portador. La energía total del mismo, E , se obtiene sumando la energía asociada al vector

\vec{k}_{\parallel} a cada ε_z , obteniéndose la relación $E(\vec{k}_{\parallel})$. Cada autovalor proporciona una subbanda de energía, por lo que el resultado final es una estructura de subbandas cuyo conocimiento es fundamental para el estudio de la dinámica del portador, y por tanto su evaluación tiene un gran interés.

Con respecto al *scattering*, la envolvente de la función de onda del portador no es en este caso una onda plana en las tres direcciones. La interacción con los fonones de la red, con las impurezas, con las rugosidades de las *interfaces* entre barreras y pozos en la estructura, y en definitiva, con cada uno de los factores que provocan *scattering* en la trayectoria del portador, se deberá estudiar teniendo en cuenta la envolvente de la función de onda calculada según la resolución de la ecuación de Schrödinger.

Sin embargo, cuando no hay un valor de masa efectiva determinado, sino que éste puede variar debido a la no parabolicidad de la banda o a su anisotropía, el procedimiento indicado no proporciona una solución para estudiar los efectos cuánticos en el comportamiento del portador. Por ello, es necesario hacer un estudio más profundo que considere estas características de la banda de una forma similar a la expuesta.

Con esta motivación, al comienzo de la década de los ochenta varios autores [Miller, 1984], [Yamada, 1985], [Hiroshima, 1986], [Nelson, 1987] intentaron introducir los efectos de la no parabolicidad de la banda de conducción en la ecuación de Schrödinger de masa efectiva. Sin embargo, entre ellos existían discordancias en algunos puntos de sus planteamientos, como por ejemplo en la aplicación de las condiciones de contorno. Por ello cada autor obtenía resultados distintos e incluso contradictorios con los de otros. Persson y Cohen [Persson, 1988] y Ekenberg [Ekenberg, 1989] propusieron nuevas formas de resolver la ecuación de Schrödinger de masa efectiva incorporando la no parabolicidad de la banda haciendo uso de aproximaciones de cuarto orden de la relación $\varepsilon(\vec{k})$ en las cercanías de su fondo. Siguiendo un planteamiento similar, López-Villanueva *et al.* [López-Villanueva, 1993] resolvieron sin necesidad de aproximaciones de un cierto orden la ecuación de Schrödinger de masa efectiva para un modelo ampliamente usado de la banda de conducción [Conwell, 1968]:

$$\varepsilon \times (1 + \alpha\varepsilon) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (3.2)$$

siendo α un parámetro usado para modelar el comportamiento no parabólico de la banda de conducción. Los resultados del trabajo de López-Villanueva *et al.* demuestran que los estudios en los que se limita hasta cuarto orden la expansión en serie de potencias de la relación $\varepsilon(\vec{k})$ son insuficientes, especialmente cuando nos alejamos del fondo de la subbanda, donde las soluciones del método exacto y la expansión hasta cuarto orden presentan notables diferencias.

Sin embargo, el modelo de la ecuación (3.2) tiene un límite de validez de unos 500 meV para Si, y es posible que para aumentar la precisión con la que se describa la banda de conducción posiblemente sea necesario emplear parametrizaciones de la banda diferentes. Y en relación al objeto de este trabajo, el modelo de banda de valencia que se ha desarrollado en la misma no ha podido ser parametrizado convenientemente siguiendo una estructura del tipo (3.2), sino que se ha optado por una parametrización del tipo (1.22), por lo que no fue posible aplicar el procedimiento de López-Villanueva *et al.* en nuestro estudio. Por este motivo, en este trabajo se han investigado las bases de los métodos de Persson y Cohen, Ekenberg y López-Villanueva *et al.* para obtener un método de resolver la ecuación de Schrödinger de masa efectiva para una banda cuya no parabolicidad se modele de una forma general, y de esta manera podremos aplicarlo al modelo de banda de valencia expuesto.

3.2 Ecuación de Schrödinger de masa efectiva para bandas isótropas y no parabólicas

Abordamos en esta sección el estudio de la ecuación de Schrödinger de masa efectiva siguiendo los pasos de López-Villanueva *et al.* para una banda isótropa y no parabólica. Como se ha indicado previamente, para el estudio de dispositivos de tipo FET y superredes se admite que existe una dirección a lo largo de la cual hay una estructura de pozos y barreras que es la responsable de la aparición de efectos cuánticos, mientras que en el plano perpendicular a dicha dirección el semiconductor se comporta como un cristal perfectamente periódico. Identificaremos en este estudio esta dirección de confinamiento

con el eje Z de nuestro sistema de referencia. Por tanto, se puede admitir que las funciones envolventes de la función de onda del portador pueden escribirse

$$F(\vec{r}) = \zeta(z)e^{i(k_x x + k_y y)} \quad (3.3)$$

siendo $\zeta(z)$ la función envolvente en la dirección de confinamiento, que ya fue presentada en la introducción de este capítulo. Como se puede observar, la estructura anterior para la función envolvente conserva el carácter de onda plana en el plano XY.

La relación entre la energía y el momento, $\varepsilon(\vec{k})$, de una banda isótropa y no parabólica puede escribirse en función de k^2 , y por consiguiente es posible desarrollar ésta en serie de potencias de k^2 de la forma siguiente [Gómez-Campos, 2005d]

$$\varepsilon(\vec{k}) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n k^{2n} \quad (3.4)$$

Los términos b_n se calculan usando el teorema de Taylor. Además, ya que las relaciones $\varepsilon(\vec{k})$ usuales son funciones matemáticas que no presentan singularidades, el desarrollo en serie de potencias de la ecuación (3.4) tiene radio de convergencia infinito. Por tanto, la relación $\varepsilon(\vec{k})$ se puede considerar idéntica a su desarrollo en serie de potencias para cualquier valor del vector de onda. El término $n=0$ se incluye para considerar aquellos casos en los que la relación $\varepsilon(\vec{k})$ toma un valor distinto de cero cuando $\vec{k} = 0$, como es el caso de la banda de huecos *split-off*. Según el Teorema de la Masa Efectiva, el vector de onda \vec{k} puede sustituirse por el operador $-i\nabla$ en la ecuación (3.4), y de esta forma se obtiene un operador $\varepsilon(-i\nabla)$

$$\varepsilon(-i\nabla) = \sum_{n=0}^{\infty} \left[b_n \times \left(-\nabla_{\parallel}^2 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)^n \right] \quad (3.5)$$

siendo $\nabla_{\parallel}^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$. Cuando se aplica este operador a la envolvente de la función de

onda de la ecuación (3.3) se obtiene

$$\varepsilon(-i\nabla)F(\vec{r}) = \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \left[b_n \times \left(-k_{\parallel}^2 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)^n \right] \right\} F(\vec{r}) = \varepsilon(k_{\parallel}^2, k_z^2) F(\vec{r}) = -\frac{\partial^2}{\partial z^2} F(\vec{r}) \quad (3.6)$$

El nuevo operador $\varepsilon(k_{\parallel}^2, k_z^2 = -\frac{\partial^2}{\partial z^2})$ es una función del vector de onda paralelo, $\vec{k}_{\parallel} = (k_x, k_y, 0)$, y como operador diferencial sólo afecta a la componente z de la envolvente de la función de onda, ya que al aplicar el operador $\varepsilon(-i\nabla)$ sobre una función con la estructura de la ecuación (3.3) las derivadas en las componentes x e y del operador ∇_{\parallel}^2 de la ecuación (3.6) pueden sustituirse por el vector de onda paralelo al cuadrado. A partir de esta conclusión, se puede encontrar la forma del operador $\varepsilon(k_{\parallel}^2, k_z^2 = -\frac{\partial^2}{\partial z^2})$ como se indica a continuación: se desarrolla la relación $\varepsilon(\vec{k})$ en serie de potencias de k_z^2 en torno a $k_z = 0$, y seguidamente se sustituye $k_z^2 \rightarrow -\frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

$$\varepsilon(k_{\parallel}^2, k_z^2 = -\frac{\partial^2}{\partial z^2}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} \frac{d^l \varepsilon}{d(k^2)^l} \Big|_{k_z^2=0} \left(-\frac{d^2}{dz^2}\right)^l \quad (3.7)$$

donde se ha usado que $\frac{d(k^2)}{d(k_z^2)} = 1$, siendo $\frac{d(k^2)}{d(k_z^2)}$ la primera derivada de k^2 con respecto a k_z^2 . Para desarrollar la ecuación de Schrödinger de masa efectiva de una manera paralela a la planteada por los autores que previamente abordaron este problema [Persson, 1988], [Ekenberg, 1989], [López-Villanueva, 1993] identificamos el operador de la ecuación (3.7) con el operador energía cinética. Por tanto escribiremos la ecuación de Schrödinger de masa efectiva como [Gómez-Campos, 2005d]:

$$\left[\sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{l!} \frac{d^l \varepsilon}{d(k^2)^l} \Big|_{k_z^2=0} \frac{d^{2l}}{dz^{2l}} + V(z) \right] \zeta(z) = E\zeta(z) \quad (3.8)$$

siendo E la energía total de la partícula y $V(z)$ el potencial electrostático aplicado a la estructura. Al igual que la ecuación (3.1), la ecuación diferencial se plantea únicamente para la componente de la función envolvente en la dirección de confinamiento, $\zeta(z)$.

En trabajos anteriores [López-Villanueva, 1993] se definieron dos conceptos útiles para la resolución de la ecuación de Schrödinger de masa efectiva: la *energía paralela*, ε_{\parallel} , que es el primer término de la sumatoria de la ecuación (3.8),

$$\varepsilon_{\parallel} \equiv \varepsilon(\vec{k}) \Big|_{k_z=0} \quad (3.9)$$

y el autovalor E_z , definido como

$$E_z \equiv E - \varepsilon_{\parallel} \quad (3.10)$$

Respecto al primer concepto, para un portador con un cierto vector de onda, su energía paralela puede calcularse sencillamente anulando la componente z de dicho vector y evaluando la relación $\varepsilon(\vec{k})$ para el vector de onda resultante. Con respecto al segundo concepto, es el autovalor de la siguiente ecuación diferencial

$$\sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l}{l!} \left. \frac{d^l \varepsilon}{d(k^2)^l} \right|_{k_z^2=0} \frac{d^{2l} \zeta(z)}{dz^{2l}} + V(z)\zeta(z) = E_z \zeta(z) \quad (3.11)$$

Esta ecuación se obtiene a partir de la ecuación (3.8), trasladando el primero de los términos de la sumatoria, la energía paralela, al miembro de la derecha. Se entiende la utilidad de E_z cuando se compara la anterior ecuación con la ecuación (3.1), puesto que se alcanza una forma para la ecuación de Schrödinger semejante en cierta manera a los planteamientos originales de Stern [Stern, 1972], y por tanto es posible establecer la comparación entre los resultados. Una de estas comparaciones da lugar a un hecho que merece la pena ser destacado por su importancia en el estudio de la ecuación de Schrödinger de masa efectiva con no parabolicidad: mientras que una banda parabólica da lugar a una ecuación de Schrödinger cuyos autovalores ε_z son constantes, la introducción de la no parabolicidad en la ecuación de Schrödinger de masa efectiva da como resultado un conjunto de autovalores E_z dependientes del valor del vector de onda paralelo, $E_z(k_{\parallel})$. Por eso, el estudio de la ecuación de Schrödinger incorporando la no parabolicidad es más complejo, ya que para cada valor de k_{\parallel} hay que resolver la ecuación (3.11).

3.3 Aproximación del potencial de pasos constantes

La resolución analítica de la ecuación diferencial (3.11) para un cierto potencial general $V(z)$ puede ser una tarea prácticamente imposible. Por este motivo, el procedimiento que se empleará para resolverla se basa en la aproximación del potencial de pasos constantes. Dicha aproximación consiste en discretizar el potencial en intervalos, asignándole a cada

uno de ellos un valor constante V . De esta forma el proceso para resolver la ecuación diferencial (3.11) se simplifica, ya que se puede proponer en cada uno de estos intervalos la siguiente forma para la función $\zeta(z)$ [Gómez-Campos, 2005d]

$$\zeta(z) = Ae^{ik_z z} + Be^{-ik_z z}, \text{ para } E_z > V \quad (3.12)$$

$$\zeta(z) = Ae^{\kappa_z z} + Be^{-\kappa_z z}, \text{ para } E_z < V \quad (3.13)$$

siendo A y B dos constantes que se encontrarán a partir de las condiciones de contorno que se determinarán con detalle más adelante, y k_z y κ_z son, en principio, parámetros de la función que se calcularán como se verá a continuación. En lo sucesivo llamaremos *pozos* a aquellos intervalos en los que $E_z > V$ y *barreras* a aquellos intervalos donde $E_z < V$. El método de cálculo consistirá en suponer un valor de E_z y resolver la ecuación diferencial usando la aproximación del potencial de pasos constantes una vez que se haya prefijado el vector de onda paralelo para el que vamos a resolver la ecuación de Schrödinger. En función del número de nodos de la función $\zeta(z)$ se estimará si el nuevo valor que se proponga para E_z ha de ser mayor o menor que el anterior, o si por el contrario puede ser aceptado como resultado final si se encuentra dentro de unos márgenes de tolerancia que se establezcan.

3.3.1 Solución en los pozos $E_z > V$

Cuando se usa la forma de la función $\zeta(z)$ indicada en la ecuación (3.12) en la ecuación (3.11) para un intervalo de potencial constante V tal que $E_z > V$ se obtiene

$$\sum_{l=1}^{\infty} \frac{k_z^{2l}}{l!} \left. \frac{d^l \varepsilon}{d(k^2)^l} \right|_{k_z^2=0} = E_z - V, \quad E_z > V \quad (3.14)$$

La sumatoria del miembro de la izquierda es el desarrollo de la relación $\varepsilon(\vec{k})$ en serie de Taylor en la variable k_z^2 en torno a $k_z = 0$ al que se le ha restado el primero de los términos, la energía paralela. De esta forma esta identificación nos conduce al siguiente resultado

$$\varepsilon(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = E_z - V + \varepsilon_{\parallel} \quad (3.15)$$

La aplicación de esta igualdad a una relación $\square(\vec{k})$ en particular proporciona el valor de k_z del intervalo.

3.3.2 Solución en las barreras $E_z < V$

Para el caso de las barreras se analizarán dos procedimientos distintos. El primero de ellos, que llamaremos *procedimiento directo*, se basa en la obtención del valor de κ_z de la función envolvente igual a como se ha indicado para el caso de los pozos. El segundo de ellos consiste en suponer como válida una aproximación de relación $\square(\vec{k})$ parabólica en las barreras, y la denominaremos *aproximación de parabolicidad en las barreras*. A continuación se desarrollan ambas y se exponen sus ventajas e inconvenientes

Procedimiento directo

Para obtener κ_z en cada intervalo, introducimos la función $\square(z)$ con la forma de la ecuación (3.13) en la ecuación (3.11), obteniéndose la siguiente relación

$$\sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l \kappa_z^{2l}}{l!} \left. \frac{d^l \varepsilon}{d(k^2)^l} \right|_{k_z^2=0} = E_z - V, \quad E_z < V \quad (3.16)$$

La sumatoria del miembro de la izquierda es el desarrollo de la relación $\square(\vec{k})$ en serie de Taylor en torno a $k_z = 0$ menos la energía paralela, evaluado en $k_z^2 = -\kappa_z^2$. Por lo tanto

$$\varepsilon(k_x^2 + k_y^2 - \kappa_z^2) = E_z - V + \varepsilon_{\parallel} \quad (3.17)$$

Este resultado se ha obtenido directamente, como en el caso de los pozos, sin necesidad de introducir ninguna aproximación adicional. No obstante, en los casos en los que se cumple que $E_z - V + \varepsilon_{\parallel} < 0$, como por ejemplo cerca del fondo de las subbandas, donde $\varepsilon_{\parallel} \approx 0$, la relación anterior implicaría evaluar la relación $\varepsilon(\vec{k})$ dentro del *gap*, donde habitualmente los modelos de banda no están definidos.

Aproximación de parabolicidad en las barreras

Otra alternativa para resolver la ecuación diferencial en aquellos intervalos en los que $E_z < V$ es despreciar la no parabolicidad de la banda y usar una banda parabólica en la ecuación diferencial. Ésta podría ser, en principio, una alternativa útil para resolver la ecuación de Schrödinger de masa efectiva cuando no se conoce la relación $\varepsilon(\vec{k})$ en el *gap*, aunque, a diferencia del procedimiento directo, no sería la solución exacta del problema. De esta forma, los efectos de la no parabolicidad de la banda se incorporarían en la ecuación de Schrödinger en los intervalos de pozos [Gómez-Campos, 2005d].

Dentro de esta aproximación, la ecuación diferencial es

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + V(z)\psi(z) = E_z\psi(z) \quad (3.18)$$

Introduciendo la forma de la función envolvente de la ecuación (3.13) se obtiene

$$\psi^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} (V - E_z) \quad (3.19)$$

Una primera aproximación que se puede llevar a cabo consiste en tomar como valor de masa efectiva m^* el valor en el fondo de la banda.

3.4 Condiciones de contorno

Una vez que se ha determinado los valores de k_z (en el caso de los pozos) o de ψ_z (en el caso de las barreras) para cada uno de los intervalos de la discretización del potencial, queda por calcular los valores de las constantes A y B en cada intervalo para que las funciones envolventes de las ecuaciones (3.12) y (3.13) estén determinadas. Como se indicó anteriormente, dichas constantes se obtendrán a partir de la imposición de las condiciones de contorno de la función envolvente.

Durante las últimas décadas muchos autores han tratado el problema de las condiciones de contorno para las funciones envolventes cuando se trabaja dentro de las aproximaciones del Teorema de la Masa Efectiva, sin llegar a ninguna conclusión determinante [Foreman, 1998]. Sin embargo, por su simplicidad y su utilidad en la descripción de los fenómenos

físicos, la mayoría de los trabajos sobre este tema admiten como válidas las siguientes condiciones de contorno: i) continuidad de la función envolvente y ii) continuidad de la corriente de densidad de probabilidad.

Mientras que la imposición de continuidad en la función envolvente es trivial, para imponer la segunda condición de contorno es necesario hacer un estudio previo. Teniendo en cuenta que la relación existente entre la derivada de la componente z de la corriente de densidad de probabilidad y el hamiltoniano del problema [López-Villanueva, 1993] es

$$\frac{dj_z}{dz} = \frac{i}{\hbar} \left[\psi^*(z) H \psi(z) - \psi(z) H \psi^*(z) \right] \quad (3.20)$$

se puede calcular la función de corriente de densidad de probabilidad para pozos y barreras como se detallará a continuación.

3.4.1 Corriente de densidad de probabilidad en los pozos ($E_z > V$)

Combinando la relación (3.20) con el hamiltoniano de la ecuación (3.8) se obtiene

$$\frac{dj_z}{dz} = \frac{i}{\hbar} \sum_{l=1}^{\infty} \left[\frac{(-1)^l}{l!} \frac{d^l \psi}{d(k^2)^l} \Big|_{k^2=0} \psi^*(z) \frac{d^{2l} \psi(z)}{dz^{2l}} - \psi(z) \frac{d^{2l} \psi^*(z)}{dz^{2l}} \right] \quad (3.21)$$

Usando la relación

$$\psi^*(z) \frac{d^{2l} \psi(z)}{dz^{2l}} - \psi(z) \frac{d^{2l} \psi^*(z)}{dz^{2l}} = \frac{d}{dz} \sum_{r=0}^{2l-1} (-1)^r \frac{d^r \psi^*(z)}{dz^r} \frac{d^{2l-r-1} \psi(z)}{dz^{2l-r-1}} \quad (3.22)$$

encontramos la expresión que permite calcular la corriente de densidad de probabilidad

$$j_z = \frac{i}{\hbar} \sum_{l=1}^{\infty} \left[\frac{(-1)^l}{l!} \frac{d^l \psi}{d(k^2)^l} \Big|_{k^2=0} \right] \times \sum_{r=0}^{2l-1} (-1)^r \frac{d^r \psi^*(z)}{dz^r} \frac{d^{2l-r-1} \psi(z)}{dz^{2l-r-1}} \quad (3.23)$$

A continuación se introduce la función $\psi(z)$ del pozo, ecuación (3.12), teniendo en cuenta que se satisfacen las siguientes relaciones

$$\begin{aligned} & r \text{ par } \frac{d^r \psi^*(z)}{dz^r} \frac{d^{2l-r-1} \psi(z)}{dz^{2l-r-1}} = (-1)^r (-k_z^2)^{l-1} \psi^*(z) \frac{d\psi(z)}{dz} \\ & r \text{ impar } \frac{d^r \psi^*(z)}{dz^r} \frac{d^{2l-r-1} \psi(z)}{dz^{2l-r-1}} = (-1)^{r-1} (-k_z^2)^{l-1} \psi(z) \frac{d\psi^*(z)}{dz} \end{aligned} \quad (3.24)$$

La sumatoria sobre r de la ecuación (3.23) tiene l términos pares y l términos impares. Por consiguiente, a partir de las ecuaciones (3.23) y (3.24) se obtiene

$$j_z = -\frac{i}{h} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{l(k_z^2)^{l-1}}{l!} \frac{d^l \psi}{d(k^2)^l} \Big|_{k_z^2=0} \times \psi^*(z) \frac{d\psi(z)}{dz} - \psi(z) \frac{d\psi^*(z)}{dz} \quad (3.25)$$

El primer término entre corchetes se corresponde con la expansión en serie de potencias de la primera derivada de la relación $\psi(k)$ con respecto a k^2 en torno a $k_z = 0$, y por tanto la anterior ecuación puede escribirse de forma más sencilla como sigue

$$j_z = -\frac{i}{h} \frac{d\psi}{d(k^2)} \Big|_{k_x^2+k_y^2+k_z^2} \times \psi^*(z) \frac{d\psi(z)}{dz} - \psi(z) \frac{d\psi^*(z)}{dz} \quad (3.26)$$

En esta expresión, el subíndice de la derivada indica el valor de k^2 en el que debe ser evaluada. Este resultado está en acuerdo con las conclusiones obtenidas por Nag [Nag, 1991].

3.4.2 Corriente de densidad de probabilidad en las barreras ($E_z < V$)

Procedimiento directo

Introduciendo las funciones envolventes en la barrera de la ecuación (3.13) en la ecuación (3.23) y razonando del mismo modo que para el caso de los pozos se encuentra que

$$j_z = -\frac{i}{h} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{l(-k_z^2)^{l-1}}{l!} \frac{d^l \psi}{d(k^2)^l} \Big|_{k_z^2=0} \times \psi^*(z) \frac{d\psi(z)}{dz} - \psi(z) \frac{d\psi^*(z)}{dz} \quad (3.27)$$

Por tanto, la componente z de la corriente de densidad de probabilidad se corresponde con la siguiente expresión

$$j_z = -\frac{i}{\hbar} \frac{d\psi}{d(k^2)} \Big|_{k_x^2+k_y^2-k_z^2} \times \psi^*(z) \frac{d\psi(z)}{dz} - \psi(z) \frac{d\psi^*(z)}{dz} \quad (3.28)$$

Igualmente que en el caso de los pozos, el subíndice de la derivada indica el valor de k^2 en el que debe ser evaluada. Apréciese que la diferencia entre la corriente de densidad de probabilidad en los pozos y las barreras reside en este aspecto del cálculo.

Aproximación de parabolicidad en las barreras

Finalmente investigamos la corriente de densidad de probabilidad en las barreras suponiendo una relación $\psi(k)$ parabólica. En este caso el cálculo de la corriente de densidad de probabilidad es directo

$$j_z = -\frac{i\hbar}{2m} \psi^*(z) \frac{d\psi(z)}{dz} - \psi(z) \frac{d\psi^*(z)}{dz} \quad (3.29)$$

3.4.3 Conclusión

En resumen, el procedimiento descrito sigue los siguientes pasos: i) inicialmente se impone el vector de onda paralelo, $\vec{k}_{\parallel} = (k_x, k_y, 0)$, para el que se quiere estimar la energía del portador, ii) se propone un valor de E_z , iii) se calculan los valores de k_z y ψ_z para pozos (ecuación (3.15)) y barreras (ecuación (3.17) o (3.19)) respectivamente, iv) se calculan los valores de A y B para cada intervalo imponiendo las condiciones de contorno y v) viendo el número de nodos de la función envolvente $\psi(z)$ se estima un nuevo valor de E_z o se acepta el resultado como solución de la ecuación de Schrödinger de masa efectiva.

El método desarrollado hasta el momento ha sido comparado con el de López-Villanueva *et al.* [López-Villanueva, 1993], y se ha comprobado que éste último constituye un caso particular del expuesto en este trabajo.

Para clarificar cómo se ha de aplicar el método expuesto, en las siguientes secciones lo usaremos para resolver la cuantización de la energía en las bandas de valencia de Si y Ge en nanoestructuras.

3.5 Cuantización de la energía en las bandas de valencia de Si y Ge

El método desarrollado hasta este punto en este capítulo se ha orientado a bandas isotropas y no parabólicas. Ya que el modelo de banda de valencia descrito en este trabajo incluye la descripción de la anisotropía de la banda, la aplicación del método de resolución de la ecuación de Schrödinger de masa efectiva no es aplicable directamente al mismo. Sin embargo, podemos adaptar el modelo de banda de forma que mantenga el mismo perfil de no parabolicidad, pero desprecie los efectos de la anisotropía usando para ello una masa efectiva promedio, ecuaciones (2.40) y (2.41). Tras efectuar esta aproximación, el modelo de banda de valencia al que se aplica el método de resolución de la ecuación de Schrödinger de masa efectiva en este apartado es el siguiente

$$\begin{aligned}
 \psi_H^r(k) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m_H} \psi_H(\mathbf{k}), \mathbf{k} \geq 0 \\
 \psi_L^r(k) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m_L} \psi_L(\mathbf{k}), \mathbf{k} \geq 0 \\
 \psi_S^r(k) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{so}} \psi_S(\mathbf{k}) + \psi_{so}, \mathbf{k} \geq \mathbf{k}_{so}
 \end{aligned} \tag{3.30}$$

3.5.1 Cálculo de la energía paralela

Puesto que la incorporación de los efectos debidos a la no parabolicidad de la banda en la ecuación de Schrödinger tienen como consecuencia la dependencia del autovalor E_z con el vector de onda paralelo, el primer paso para emprender la resolución del problema es especificar el valor de $\vec{k}_{\parallel} = (k_x, k_y, 0)$ para el que se quiere resolver. Seguidamente, atendiendo a su definición en la ecuación (3.9) se calcula el valor de la energía paralela ε_{\parallel} , dado por las siguientes relaciones:

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon_{\parallel}}{\epsilon(\epsilon_{\parallel})} &= \frac{\hbar^2}{2m_{H,L}}(k_x^2 + k_y^2) \quad ; \text{ Huecos pesados y ligeros} \\ \frac{\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{so}}{\epsilon(\epsilon_{\parallel})} &= \frac{\hbar^2}{2m_{so}}(k_x^2 + k_y^2) \quad ; \text{ Huecos split - off} \end{aligned} \quad (3.31)$$

A continuación se propone un valor de E_z para la ecuación diferencial. Conociendo k_{\parallel} , ϵ_{\parallel} y E_z se puede calcular k_z (o ϵ_z) en cada intervalo.

3.5.2 Vector de onda en cada intervalo

k_z en los pozos

En aquellos intervalos donde $E_z > V$ el valor de k_z se obtiene de la función envolvente, ecuación (3.12), a partir de la relación (3.15), la cual indica que la energía en la relación $\epsilon(k)$ debe hacerse igual a $E_z - V + \epsilon_{\parallel}$. Efectuando esa operación y despejando k_z se obtiene [Gómez-Campos, 2005d]

$$\begin{aligned} k_z^2 &= \frac{2m_{H,L}}{\hbar^2} \frac{\epsilon_{\parallel}}{\epsilon_{H,L}(E_z - V + \epsilon_{\parallel})} - \frac{\epsilon_{\parallel}}{\epsilon_{H,L}(\epsilon_{\parallel})} \quad ; \text{ Huecos pesados y ligeros} \\ k_z^2 &= \frac{2m_{so}}{\hbar^2} \frac{\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{so}}{\epsilon_s(E_z - V + \epsilon_{\parallel})} - \frac{\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{so}}{\epsilon_s(\epsilon_{\parallel})} \quad ; \text{ Huecos split - off} \end{aligned} \quad (3.32)$$

ϵ_z en las barreras

Procedimiento directo

Si se elige para el cálculo el procedimiento directo, se determina el parámetro ϵ_z de las funciones (3.13) para aquellos intervalos donde $E_z < V$ a partir de (3.17) [Gómez-Campos, 2005d]

$$\begin{aligned} \kappa_z^2 &= \frac{2m_{H,L}}{\hbar^2} \frac{\kappa_{\parallel}}{\kappa_{H,L}(\kappa_{\parallel})} - \frac{E_z - V + \kappa_{\parallel}}{\kappa_{H,L}(E_z - V + \kappa_{\parallel})} \kappa_{\parallel} ; \text{ Huecos pesados y ligeros} \\ \kappa_z^2 &= \frac{2m_{so}}{\hbar^2} \frac{\kappa_{\parallel} - \kappa_{so}}{\kappa_s(\kappa_{\parallel})} - \frac{E_z - V + \kappa_{\parallel} - \kappa_{so}}{\kappa_s(E_z - V + \kappa_{\parallel})} \kappa_{\parallel} ; \text{ Huecos split - off} \end{aligned} \quad (3.33)$$

Como se indicó en la sección 3.3.2, el procedimiento directo puede presentar problemas cuando $E_z - V + \kappa_{\parallel} < 0$, ya que en ese caso las funciones κ no están definidas. No obstante, un valor suficientemente alto de κ_{\parallel} evita este inconveniente, permitiendo aplicar el procedimiento directo para evaluar las regiones de altas energías de las subbandas. En la sección siguiente aprovecharemos este hecho para comparar los dos métodos de resolución de la ecuación de Schrödinger en las barreras planteados en este trabajo.

Aproximación de parabolicidad en las barreras

La aproximación de una relación $\kappa(\vec{k})$ parabólica en las barreras proporciona trivialmente el siguiente resultado [Gómez-Campos, 2005d]

$$\kappa_z^2 = \frac{2m_{H,L,so}}{\hbar^2} (V - E_z) \quad (3.34)$$

3.5.3 Condiciones de contorno

La primera condición de contorno que impondremos es la continuidad de la función envolvente. La segunda será la continuidad de la corriente de densidad de probabilidad j . En las secciones previas hemos desarrollado las expresiones de la corriente de densidad de probabilidad para los pozos y las barreras. Una característica común a todas las expresiones de la corriente de la probabilidad es la aparición de la primera derivada de la relación $\kappa(\vec{k})$ con respecto a k^2 . Para el modelo de banda de valencia de la ecuación (3.30) esta derivada es [Gómez-Campos, 2005d]

$$\frac{d\kappa}{d(k^2)} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{\kappa(\kappa) \kappa(\kappa)}} \quad (3.35)$$

Esta relación es general para todos los tipos de huecos, usándose en cada caso las funciones ψ y ψ^* correspondientes.

Es posible simplificar el estudio de la continuidad de j_z teniendo en cuenta las siguientes propiedades: i) en la expresión de j_z en las ecuaciones (3.26), (3.28) y (3.29) aparece el término $\psi^*(z) \frac{d\psi(z)}{dz}$ y su complejo conjugado; por tanto, si el primero de los términos es continuo, lo será también el segundo y ii) puesto que la función $\psi^*(z)$ es continua por la primera condición de contorno, el estudio de la continuidad de $\psi^*(z) \frac{d\psi(z)}{dz}$ es equivalente al estudio de la continuidad de $\frac{d\psi(z)}{dz}$. De esta forma la continuidad en la corriente de densidad de probabilidad equivale a imponer la continuidad de otras funciones más sencillas de manipular matemáticamente que se indican en las secciones siguientes.

Pozos

Combinando las ecuaciones (3.15), (3.26) y (3.35), y teniendo en cuenta las propiedades i) y ii) anteriormente indicadas, se puede garantizar la continuidad de la corriente de densidad de probabilidad si la siguiente función es continua:

$$\frac{1}{m_{H,L,so}} \frac{1}{\sqrt{\psi_{H,L,so}(E_z - V + \psi_{||}) \psi_{H,L,so}(E_z - V + \psi_{||})}} \frac{d\psi}{dz} \quad (3.36)$$

Barreras

Procedimiento directo

Combinando las ecuaciones (3.17), (3.28) y (3.35) se concluye que para garantizar la continuidad de la corriente de densidad de probabilidad en las barreras es también necesario hacer que la función de la ecuación (3.36) sea continua.

Aproximación de parabolicidad en las barreras

Cuando se usa la aproximación de banda parabólica en las barreras, la función sobre la que ha de imponerse la continuidad es

$$\frac{1}{m_{H,L,so}} \frac{d\psi}{dz} \quad (3.37)$$

Aplicando las condiciones de contorno que se han detallado anteriormente es posible determinar la función envolvente $\psi(z)$ solución de la ecuación de Schrödinger de masa efectiva para el potencial en cuestión $V(z)$. Finalmente se aceptará el valor supuesto de E_z observando el número de nodos de la función envolvente.

3.5.4 Resultados

En esta sección se realiza un estudio sobre la resolución de la ecuación de Schrödinger en estructuras hechas de Si y Ge, usando para ello la aproximación isótropa de la banda de valencia, ecuación (3.30). Podremos examinar así las consecuencias de tener en cuenta la no parabolicidad en la cuantización de los niveles de energía para los huecos en estructuras fabricadas con estos semiconductores.

En primer lugar investigamos la importancia de la no parabolicidad a la hora de determinar la energía de los fondos de las subbandas. Para ello establecemos comparaciones entre los resultados que se obtienen en pozos infinitos de Si a través de aproximaciones parabólicas que usan el valor de masa efectiva del cristal en el fondo de la banda, y aquellos que se obtienen por medio del procedimiento descrito en este trabajo. En la Figura 3.1 se muestran las diferencias $E_{n,\text{parab}}(\vec{k}_{\parallel} = 0) - E_{n,\text{no parab}}(\vec{k}_{\parallel} = 0)$ para las cuatro subbandas de menor energía de huecos pesados y las tres subbandas de menor energía de ligeros y split-off. Tanto para los huecos pesados como para los ligeros estas diferencias son siempre positivas debido al mayor valor de la masa efectiva a grandes energías que a bajas. Se observa el comportamiento opuesto para las subbandas derivadas de la banda de split-off, ya que este tipo de huecos tiene mayor masa efectiva cerca del fondo de la banda, disminuyendo conforme aumenta la energía. Merece la pena destacar el hecho de que los efectos de la no parabolicidad en la cuantización de la energía son importantes en todas las subbandas cuando la anchura del pozo es menor de 10 nm. Estos efectos son más importantes en las subbandas más altas, puesto que la no parabolicidad provoca cambios notables en el valor de la masa efectiva con respecto a su valor en el fondo de la banda.

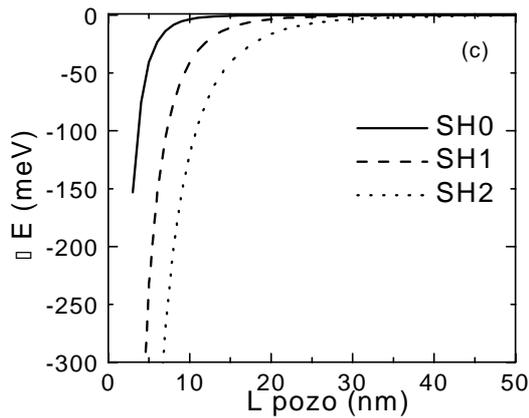
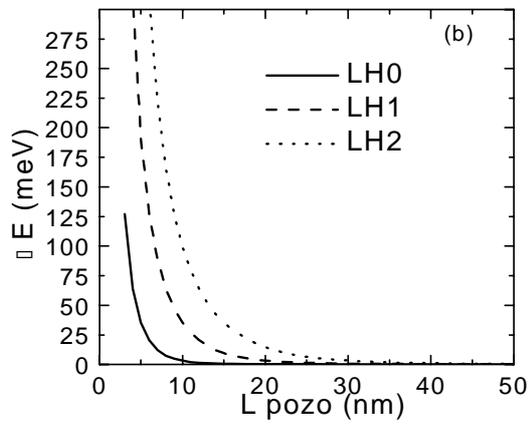
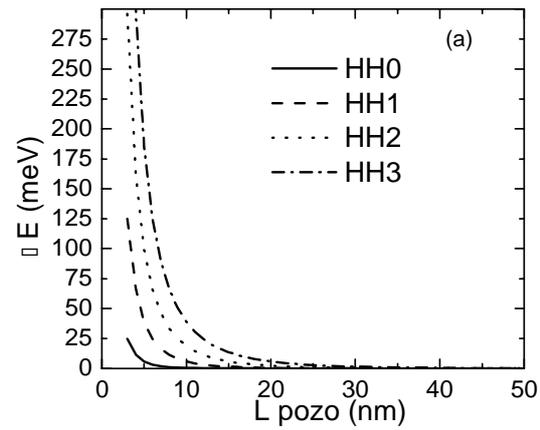


Figura 3.1: Diferencias entre la energía de los fondos de las subbandas en pozos infinitos de Si de espesores menores que 50 nm obtenidas a partir del modelo no parabólico presentado en este trabajo y de aproximaciones parabólicas de la banda usando el valor de la masa efectiva en el fondo de ésta. Las Figuras 3.1(a), 3.1(b) y 3.1(c) muestran las diferencias en los fondos de las subbandas obtenidos para los huecos pesados, ligeros y split-off respectivamente.

Además, cuando se calcula la subbanda completa, esto es, la relación $E_n(k_{\parallel}^{\perp})$, surgen grandes diferencias entre los resultados obtenidos para modelos de banda parabólica y no parabólica, siendo estas diferencias mucho más acusadas que cuando se establece la comparación únicamente para los fondos de las subbandas. Por tanto, la consideración de la no parabolicidad resulta esencial para poder determinar adecuadamente cada una de las subbandas.

En la Figura 3.2 se muestran las relaciones $E_n(k_{\parallel}^{\perp})$ para un conjunto de subbandas en dos pozos infinitos de anchuras 7 y 15 nm respectivamente. Puesto que el modelo que se ha empleado para hacer el cálculo era una aproximación isótropa de la banda, los perfiles de las bandas representados frente al módulo del vector de onda paralelo serán los mismos para todas las direcciones del plano XY. Se aprecia que, cuando el vector de onda paralelo aumenta, los efectos de la no parabolicidad se hacen más importantes incluso en las subbandas más bajas, siendo estos efectos apreciables también para pozos de anchuras mayores de 10 nm.

Hasta el momento se ha realizado un estudio de los autovalores de la ecuación de Schrödinger de masa efectiva para potenciales constantes. Este tipo de potenciales dan como resultado autovalores E_z que siempre son mayores que el valor del potencial dentro del pozo. Pero cuando el potencial no es constante, como ocurre cuando existen campos eléctricos o heteroestructuras, cabe la posibilidad de que existan zonas de barrera, regiones del espacio donde los autovalores E_z son menores que el potencial. En este capítulo se ha discutido sobre dos maneras distintas de tratar estas situaciones al resolver la ecuación de Schrödinger de masa efectiva, a saber, el método directo y la aproximación de parabolicidad en las barreras. A continuación se lleva a cabo un estudio más profundo sobre estas técnicas, aplicándolas a casos particulares. Se intenta determinar con el mismo en qué medida la aproximación de parabolicidad en las barreras proporciona resultados similares a los obtenidos por medio del método directo. Si ambas técnicas proporcionan resultados semejantes, la aproximación de parabolicidad en las barreras estaría justificada al menos en las regiones donde ambos métodos proporcionan soluciones, y se podría admitir que sus soluciones son una buena aproximación en aquellos casos en los que el método directo no es aplicable.

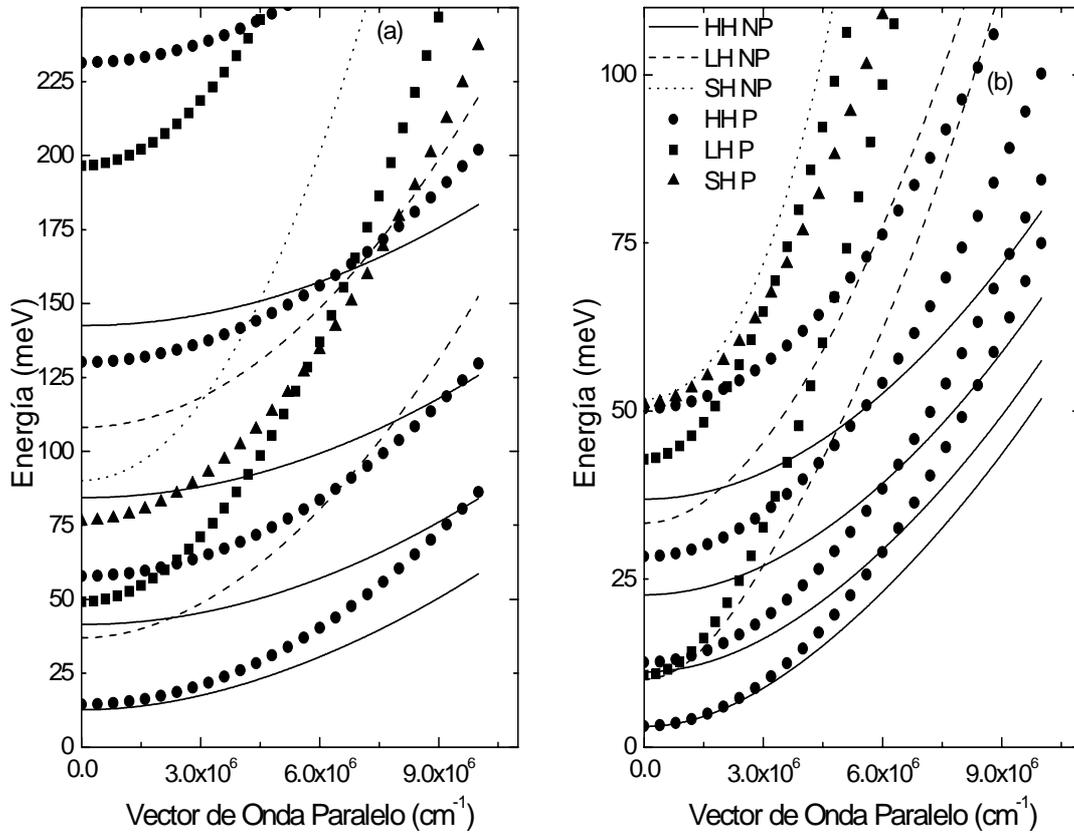


Figura 3.2: Dependencia de la energía total E con el vector de onda paralelo para dos pozos infinitos hechos de Si de espesores 7 nm (a) y 15 nm (b), obtenida usando la aproximación de parabolicidad (P) y no parabólica (NP). Las figuras muestran las cuatro subbandas de menor energía de los huecos pesados (HH), las dos subbandas de menor energía de huecos ligeros (LH) y la subbanda de menor energía de los huecos *split-off* (SH). El significado de las líneas y de los símbolos es el mismo en ambas figuras, y por claridad éstos se indican únicamente en la Figura 3.2(b).

Con la idea de comparar ambos métodos se ha estudiado la solución de la ecuación de Schrödinger de masa efectiva en una estructura artificial consistente en un pozo finito de 10 nm de anchura y 100 meV de profundidad en el seno de un semiconductor de idénticas características a las del pozo, pero con el fondo de la banda desplazado. Las subbandas de menor energía de dicha estructura tendrán regiones de barrera, y por tanto permitirán establecer las comparaciones necesarias. Este estudio se ha realizado para estructuras de Si y de Ge. En la Figura 3.3 se muestran un conjunto de las subbandas de menor energía. La Figura 3.3(a) muestra los resultados obtenidos en Si, mientras que en la Figura 3.3(b) se ha representado los resultados obtenidos para el Ge. En lo concerniente a las barreras, la

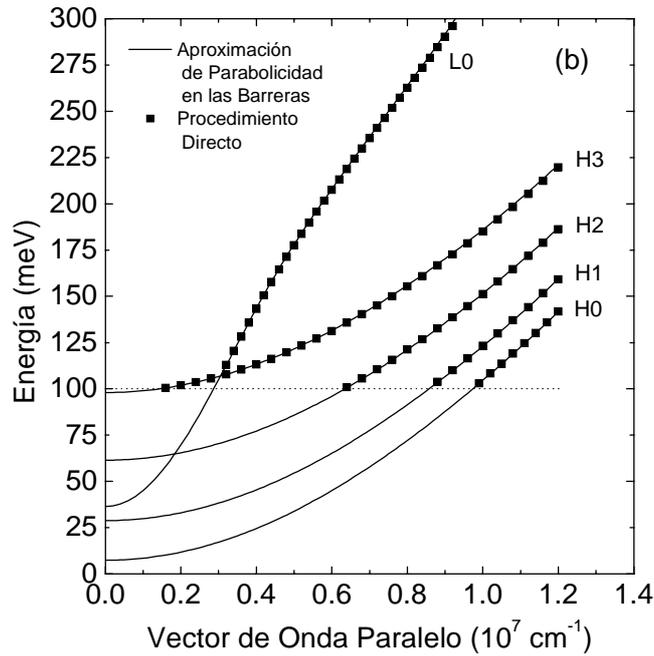
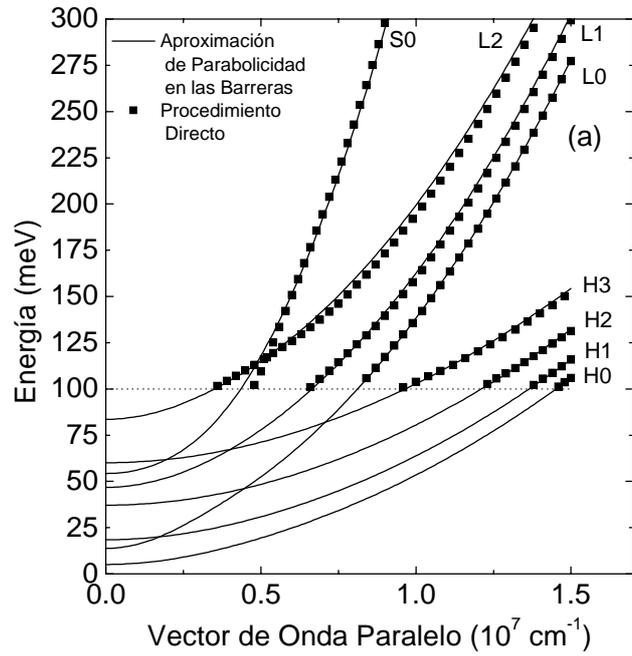


Figura 3.3: Dependencia de la energía total E con el vector de onda paralelo para un conjunto de las subbandas de menor energía en dos pozos finitos de 100 meV de profundidad y 10 nm de anchura hechos de (a) Si y (b) Ge embebidos en un material similar al del pozo.

aproximación de parabolicidad siempre proporciona una solución, mientras que el procedimiento directo tiene la limitación de que, para ser aplicable, $E_z - V + \square_{\parallel}$ ha de ser mayor o igual que cero. Por tanto, se pudo usar el procedimiento directo para evaluar sólo una parte de las subbandas, en particular para aquellos vectores de onda cuya energía paralela es lo suficientemente grande para satisfacer $E_z - V + \square_{\parallel} > 0$. Los datos muestran que las partes de las subbandas que pudieron calcularse por medio del procedimiento directo son semejantes a los resultados que nos proporcionó la aproximación de parabolicidad en las barreras. Por lo tanto, como se sugirió en la sección 3.3.2, las relaciones $E_n(\frac{\hbar}{k_{\parallel}})$ obtenidas usando el procedimiento directo y la aproximación de parabolicidad en las barreras son similares, al contrario de lo que sucede en los pozos, donde los efectos de la no parabolicidad marcan fuertemente el comportamiento de las mismas. Por esta razón, en cuanto al cálculo de las relaciones $E_n(\frac{\hbar}{k_{\parallel}})$ de las subbandas en nanoestructuras de Si o Ge, la aproximación de parabolicidad en las barreras podría ser una alternativa adecuada, con la principal ventaja de que siempre es aplicable.

3.6 Funciones envolventes

La ecuación de Schrödinger de masa efectiva (3.8) es una ecuación de valores propios. Para cada vector de onda paralelo la ecuación de Schrödinger proporciona una energía propia, $E_n(\frac{\hbar}{k_{\parallel}})$, y una función propia, $\square(z)$. Como ya se ha mostrado, las energías propias obtenidas usando un modelo parabólico en las barreras están en acuerdo con las obtenidas usando el modelo exacto desarrollado en este trabajo en aquellos casos en los que ambos procedimientos son aplicables. No obstante, esta comparación no se ha efectuado para las funciones propias obtenidas y , por consiguiente, es necesario efectuar un estudio sobre la idoneidad de las mismas como solución de la ecuación de Schrödinger de masa efectiva.

Para comenzar este estudio se observó el comportamiento de las funciones envolventes obtenidas por medio de la aproximación de parabolicidad en las barreras en pozos triangulares infinitos de Si de 10 nm de anchura, y se encontró que éstas cambiaban apreciablemente entre el fondo de la subbanda ($k_{\parallel}^{\perp} = 0$) y un cierto valor del vector de onda paralelo, a partir del cual las funciones envolventes permanecían invariables [Gómez-Campos, 2005e][Gómez-Campos, 2005f]. En la Figura 3.4 se han representado las funciones envolventes de las subbandas de menor energía de huecos pesados y ligeros en Si para los vectores de onda paralelos $k_{\parallel} = 0$, $k_{\parallel} = 10^7 \text{ cm}^{-1}$ y $k_{\parallel} = 2.5 \times 10^7 \text{ cm}^{-1}$ obtenidas a partir de la aproximación de parabolicidad en las barreras. Las funciones envolventes de $k_{\parallel} = 0$ y $k_{\parallel} = 10^7 \text{ cm}^{-1}$ presentan importantes diferencias, mientras que las funciones envolventes de $k_{\parallel} = 10^7 \text{ cm}^{-1}$ y $k_{\parallel} = 2.5 \times 10^7 \text{ cm}^{-1}$ son prácticamente idénticas.

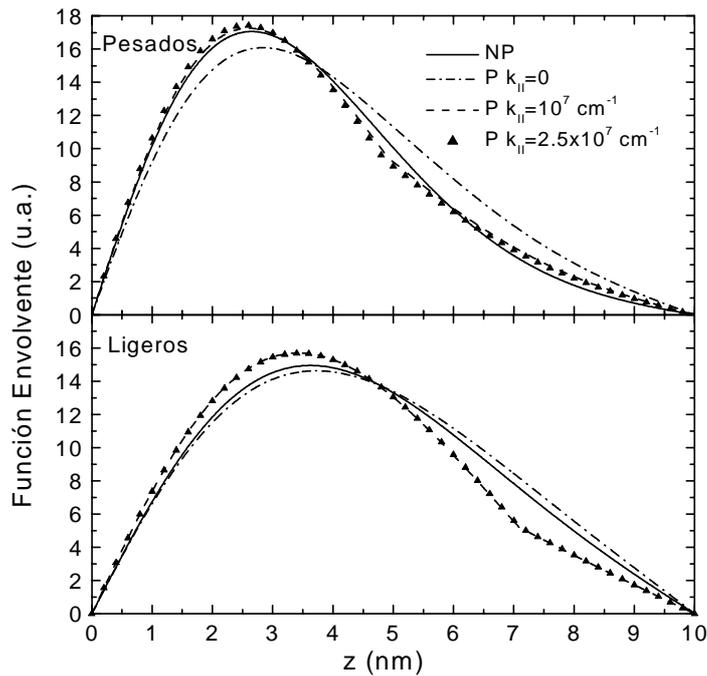


Figura 3.4: Funciones envolventes de las subbandas de menor energía de huecos pesados y ligeros en un pozo infinito de Si de 10 nm de espesor obtenidas usando el procedimiento directo (NP) y la aproximación de parabolicidad en las barreras (P) con un campo eléctrico aplicado de 50 kV/cm. La primera curva se corresponde con $k_{\parallel}=2.5 \times 10^7 \text{ cm}^{-1}$, mientras que las otras curvas se calcularon para tres valores diferentes del vector de onda paralelo.

Para comprobar la idoneidad de la solución proporcionada por la aproximación de parabolicidad en las barreras es necesario comparar las funciones envolventes con las obtenidas a través del procedimiento directo. No obstante, tan sólo para el último de los valores del vector de onda paralelo se satisfacen las condiciones necesarias para poder aplicar dicho procedimiento. Así, calculamos la función envolvente obtenida a partir de la aplicación del método directo para este caso, $k_{\parallel} = 2.5 \times 10^7 \text{ cm}^{-1}$, y la representamos junto con las anteriores en la Figura 3.4. Se puede apreciar que entre la función envolvente evaluada por el procedimiento directo y la evaluada usando la aproximación de parabolicidad en las barreras existen discrepancias notables, especialmente para el caso de los huecos ligeros. Esta primera observación es un indicio de que la aproximación de parabolicidad en las barreras, aunque suministra relaciones $E_n(k_{\parallel})$ similares a las obtenidas por el método directo, puede estar suministrando funciones envolventes diferentes de las que proporcionaría éste.

Siguiendo el estudio, intentamos determinar la causa que hace que las funciones envolventes obtenidas por la aproximación de parabolicidad en las barreras cambien con el vector de onda paralelo desde el fondo de la subbanda hasta un cierto punto, y luego permanezcan prácticamente invariables. Para ello calculamos el valor de E_z obtenido al resolver la ecuación (3.11) en los mismos casos representados en la Figura 3.4 en el rango de vectores de onda paralelos $[0, 2.5 \times 10^7 \text{ cm}^{-1}]$ usando la aproximación de parabolicidad en las barreras, y lo representamos en la Figura 3.5. En esta misma figura se indican los valores del vector de onda paralelo para los que se calcularon las funciones envolventes de la Figura 3.4.

Los resultados obtenidos sugieren la existencia de una relación entre las variaciones de E_z y las variaciones de la función envolvente con k_{\parallel} . Al igual que éstas últimas, E_z también varía entre el fondo de las subbandas y un cierto valor del vector de onda paralelo, permaneciendo invariable para valores mayores. De hecho, las funciones envolventes que difieren entre sí poseen distintos valores de E_z , mientras que las que son prácticamente iguales se encuentran en la zona donde E_z permanece constante [Gómez-Campos, 2005e][Gómez-Campos, 2005f].

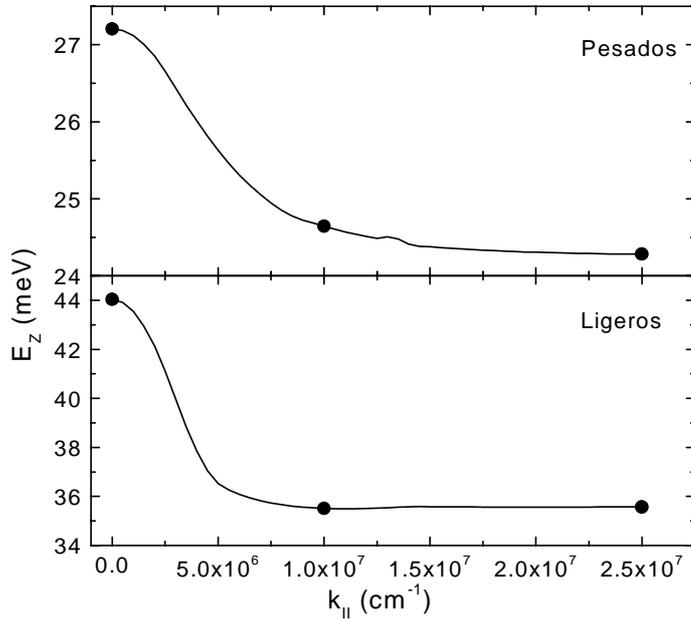


Figura 3.5: E_z para las subbandas de menor energía de huecos pesados y ligeros en las mismas condiciones que en la Figura 3.4. Los puntos indican los valores de $k_{||}$ correspondientes a las funciones envolventes representadas en la Figura 3.4.

A continuación se intentó determinar si este comportamiento se produce también en las funciones envolventes que suministra el procedimiento directo. Necesitamos para ello un perfil de potencial electrostático que proporcione una subbanda que verifique una serie de condiciones:

- Debe tener una región espacial donde $E_z < V$ (barrera) para todo valor de $k_{||}$. Si esta condición no se verificase no existiría ninguna región de barrera, y por tanto el estudio carecería de interés.

- Su fondo debe estar cerca del máximo valor del potencial, de manera que $E_n(\frac{z}{L} = 0) \approx V_{\max}$, siendo V_{\max} el máximo valor del potencial electrostático $V(z)$.

Un potencial que verifica ambas condiciones es un pozo infinito de tipo triangular de 10 nm de anchura con un campo eléctrico aplicado de 45 kV/cm, y por lo tanto el valor máximo del potencial es de 45 meV. Al resolver la ecuación de Schrödinger se estimó que la subbanda de menor energía de los huecos ligeros de Si tiene su fondo en torno a 3 meV

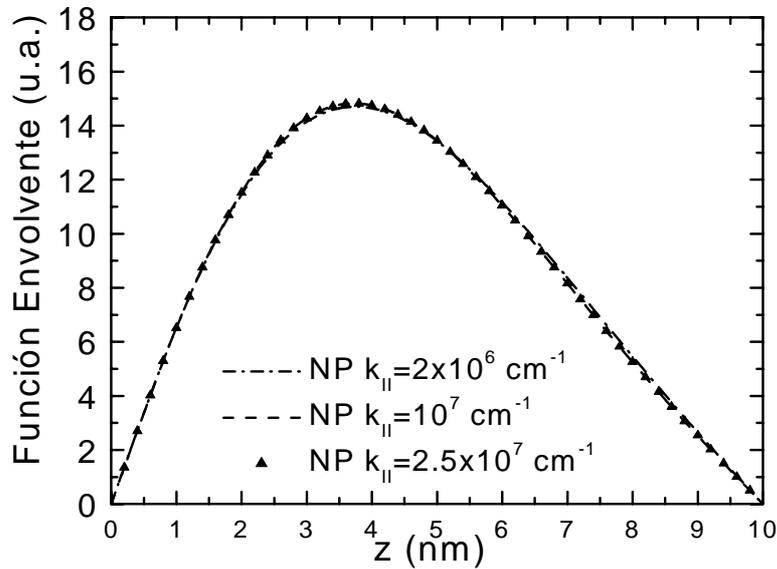


Figura 3.6: Funciones envolventes para la subbanda de menor energía de huecos ligeros en un pozo infinito con un campo eléctrico uniforme aplicado de 45 kV/cm evaluadas por medio del procedimiento directo.

por debajo de V_{\max} , reuniendo las condiciones necesarias para llevar a cabo el estudio de las funciones envolventes.

A continuación calculamos las funciones envolventes en tres valores distintos del vector de onda paralelo, a saber, $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $k_{\parallel} = 10^7 \text{ cm}^{-1}$ y $k_{\parallel} = 2.5 \times 10^7 \text{ cm}^{-1}$. El primero de los tres valores es el más bajo del vector de onda paralelo para el que se pudo aplicar el procedimiento directo sin problemas. Las tres funciones envolventes se representan en la Figura 3.6.

La figura muestra tres funciones envolventes prácticamente idénticas a pesar de sus distintos valores de k_{\parallel} , al contrario de lo que se observó cuando se aplicó la aproximación de parabolicidad en las barreras. Seguidamente estimamos el valor de E_z a lo largo de la subbanda y lo representamos en la Figura 3.7.

Los puntos señalan los valores del vector de onda paralelo para los que se calculó la función envolvente correspondiente. Se observa una fuerte variación de la función E_z a lo

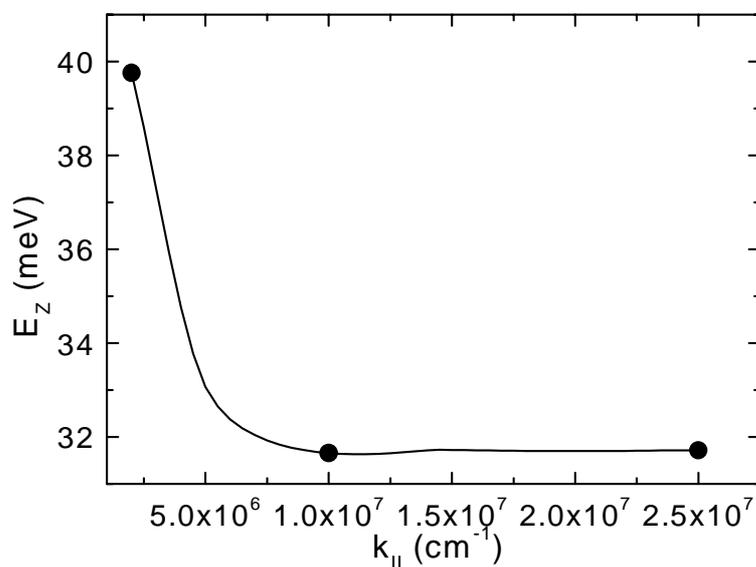


Figura 3.7: E_z para la subbanda de menor energía de huecos ligeros en las mismas condiciones que en el caso de la Figura 3.6. Los puntos indican los valores de $k_{||}$ donde se calcularon las funciones envolventes de la Figura 3.6.

largo de la subbanda, y la tendencia decreciente de la misma garantiza que la condición i) previamente reseñada siempre se verificará.

Por consiguiente, el estudio realizado indica que las funciones envolventes proporcionadas por el procedimiento directo no cambian a lo largo de la subbanda a pesar de que E_z lo haga. De esta forma, las variaciones observadas en las funciones envolventes obtenidas por la aproximación de parabolicidad en las barreras son un efecto espurio del método de resolución y, por tanto, no han de ser tenidas en cuenta. Además, una conclusión importante de este estudio es que las funciones envolventes son prácticamente independientes del vector de onda paralelo. Por tanto, una alternativa adecuada para el cálculo de las funciones envolventes podría ser a través de la determinación de éstas por medio del procedimiento directo para un $k_{||}$ lo suficientemente grande que permita la aplicación del mismo, y usar la función obtenida como función envolvente para toda la subbanda [Gómez-Campos, 2005e][Gómez-Campos, 2005f].

3.7 Ecuación de Schrödinger de masa efectiva para bandas anisótropas y no parabólicas

En los apartados anteriores hemos desarrollado la resolución de la ecuación de Schrödinger de masa efectiva para una banda isotrópica con un perfil de no parabolicidad general. Siguiendo una línea de razonamiento similar podríamos incorporar la anisotropía de la banda a la ecuación de Schrödinger y de esta manera estudiar los efectos de la misma en la cuantización de la energía y las funciones envolventes en nanoestructuras. En este sentido, el trabajo de López-Villanueva *et al.* [López-Villanueva, 1993] incorpora en el desarrollo la anisotropía elipsoidal de la banda de conducción para aquellos casos en los el confinamiento sea en una dirección en la que haya simetría de las superficies equienergéticas, a saber, las direcciones longitudinales y transversales de los elipsoides.

No obstante, la anisotropía de la banda de valencia es mucho más compleja que la de la banda de conducción, y aunque en el transcurso de esta investigación se ha intentado incorporar los efectos de la anisotropía en la ecuación de Schrödinger de masa efectiva, esta tarea está aún en desarrollo. Por ello, la línea de investigación se centrará en el futuro en este aspecto apoyándose en este trabajo.

Como una primera aproximación, en este apartado describiremos un método simple para incorporar los efectos de la variación de la masa efectiva con la dirección en las bandas de huecos pesados y ligeros en la ecuación de Schrödinger de masa efectiva. Dicho método ha sido empleado anteriormente por varios autores [Hu, 1996], [Venugopal, 2003] para el estudio de bandas anisótropas y parabólicas.

Para comenzar, definamos la función angular de masa efectiva $m(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, que para el caso de los huecos pesados y ligeros es, respectivamente,

$$m_H(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{m_0}{A [1 - g(\mathbf{k}, \mathbf{k}')] } \quad (3.38)$$

$$m_L(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{m_0}{A [1 + g(\mathbf{k}, \mathbf{k}')] } \quad (3.39)$$

Estas funciones contienen la información de la anisotropía, y por tanto son fundamentales en este estudio. La idea sobre la que se sustenta el método que se expone en esta sección es la sustitución de la relación $\epsilon(\vec{k})$ de la banda por la siguiente aproximación:

$$\epsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2} \frac{k_{\parallel}^2}{m_{\parallel}} + \frac{k_z^2}{m_z} \epsilon(\phi) \quad (3.40)$$

siendo m_z el valor de $m(\phi, \phi)$ en la dirección de confinamiento y m_{\parallel} el promedio angular de la masa efectiva en torno al máximo de la banda de valencia en el plano perpendicular a la dirección de confinamiento.

$$m_{\parallel} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} m(\phi, \phi) d\phi \quad (3.41)$$

siendo ϕ la coordenada angular del sistema de referencia de coordenadas polares en dicho plano. Este último concepto es similar al m_d^* usado por Venugopal *et al.* [Venugopal, 2003]. Con este modelo, se calcula la energía paralela como

$$\epsilon_{\parallel} = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}} \epsilon(\phi_{\parallel}) \quad (3.42)$$

La obtención de k_z en los intervalos de pozo se obtiene a partir de la ecuación (3.15), y para este modelo proporciona la igualdad

$$k_z^2 = \frac{2m_z}{\hbar^2} \frac{E_z + \epsilon_{\parallel} - V}{\epsilon_{H,L}(E_z + \epsilon_{\parallel} - V)} - \frac{m_z}{m_{\parallel}} k_{\parallel}^2 \quad (3.43)$$

Por otro lado, en las barreras se usa la aproximación de parabolicidad, de forma que ϵ_z en cada intervalo se calcula a partir de

$$\epsilon_z^2 = \frac{2m_z}{\hbar^2} (V - E_z) \quad (3.44)$$

Para calcular los coeficientes de las funciones $\psi(z)$ de las ecuaciones (3.12) y (3.13) se impone la continuidad de las mismas y de la corriente de densidad de probabilidad. La imposición de continuidad de las funciones es una cuestión trivial. Sin embargo, la segunda condición requiere una elaboración semejante a la realizada en el caso isótropo para simplificar el cálculo. Por eso, se buscaron unas funciones que garantizan la continuidad de la corriente de densidad de probabilidad si ellas son continuas, de igual manera a como se obtuvieron las ecuaciones (3.36) y (3.37). Partiendo de las ecuaciones (3.26) y (3.29) se

encuentran tales funciones. En la aproximación que se ha presentado para tener en cuenta la anisotropía de la banda de valencia, la derivada $\frac{d\psi}{d(k^2)}$ es

$$\begin{aligned} \frac{1}{m_z} + \frac{1}{m_{\parallel}} \frac{1}{\sqrt{(E-V)(E-V)}} & ; E_z > V \\ \frac{1}{m_z} & ; E_z < V \end{aligned} \quad (3.45)$$

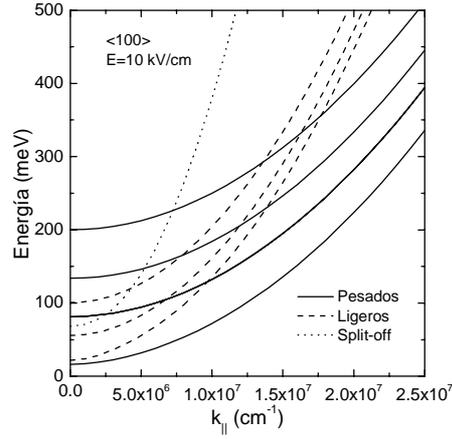
Y por tanto las funciones que han de ser continuas son las siguientes

$$\begin{aligned} \frac{1}{m_z} + \frac{1}{m_{\parallel}} \frac{1}{\sqrt{(E-V)(E-V)}} \frac{d\psi}{dz} & ; E_z > V \\ \frac{1}{m_z} \frac{d\psi}{dz} & ; E_z < V \end{aligned} \quad (3.46)$$

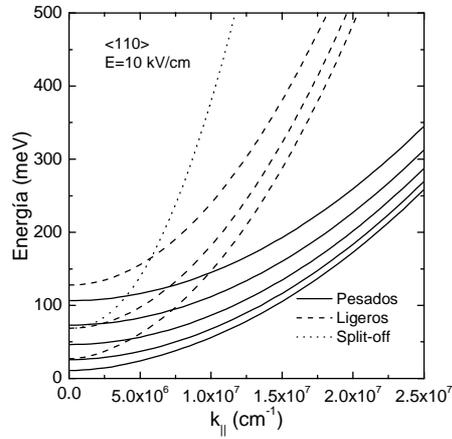
A partir de este método es posible estudiar la cuantización de la energía y las funciones de onda de gases bidimensionales de huecos en estructuras hechas de Si y Ge con una dirección de confinamiento cualquiera. Esto es especialmente importante cuando se desea comparar las consecuencias de tomar una u otra dirección de confinamiento al diseñar un dispositivo [Gómez-Campos, 2005a] [Gómez-Campos, 2005b].

Para finalizar, como ejemplo de la aplicación de este método, se resolvió la ecuación de Schrödinger de masa efectiva para un pozo triangular infinito de 10 nm de espesor con un campo eléctrico aplicado de 10 kV/cm con el confinamiento en las direcciones $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ y $\langle 111 \rangle$. La Figura 3.8 muestra las relaciones $E_n(k_{\parallel})$ de algunas subbandas de bajas energías, en concreto las cuatro más bajas de huecos pesados, las tres más bajas de huecos ligeros y la de menor energía de huecos split-off. Como se discutirá en la sección 4.3.3, este conjunto de subbandas es muy útil para el estudio del comportamiento de los huecos en la estructura SOI descrita.

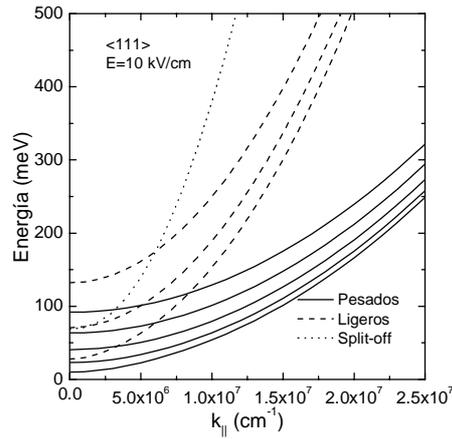
El análisis de los resultados mostrados en la Figura 3.8 conduce a una serie de conclusiones. En primer lugar, se observa que el cambio en la orientación de la dirección de confinamiento cambia el valor de la energía del fondo de las subbandas de huecos pesados y ligeros. Con respecto a los primeros, se observa una disminución en el valor de la energía de los fondos de las subbandas cuando el confinamiento se cambia de la dirección $\langle 100 \rangle$ a la $\langle 110 \rangle$, y de la dirección $\langle 110 \rangle$ a la $\langle 111 \rangle$. Además, mientras que en la dirección $\langle 100 \rangle$ las subbandas de huecos pesados aparecen muy separadas entre sí, con separaciones de más



(a)



(b)



(c)

Figura 3.8: Relaciones $E_n(k_{||}^{\pm})$ para un conjunto de subbandas de baja energía en un pozo infinito triangular de Si de 10 nm de espesor con un campo eléctrico aplicado de 10 kv/cm. La dirección de confinamiento se orienta según las direcciones cristalinas (a) $\langle 100 \rangle$, (b) $\langle 110 \rangle$ y (c) $\langle 111 \rangle$. El conjunto de subbandas está formado por las cuatro subbandas de menor energía de huecos pesados, las tres subbandas de menor energía de huecos ligeros y la subbanda de menor energía de huecos *split-off*.

de 50 meV entre ellas, al cambiar sucesivamente a las direcciones $\langle 110 \rangle$ y $\langle 111 \rangle$ esta separación se reduce significativamente. Con respecto a la curvatura de las subbandas de huecos pesados, se observa que ésta es mayor en la dirección $\langle 100 \rangle$ que en las otras dos estudiadas. Esto sugiere que la masa efectiva de los portadores en estas subbandas es más pequeña que cuando el confinamiento se realiza en las otras direcciones.

Respecto a las subbandas de huecos ligeros, el comportamiento observado es el opuesto. La energía del fondo de las subbandas aumenta al cambiar la dirección de confinamiento de la $\langle 100 \rangle$ a la $\langle 110 \rangle$, e igualmente cuando se varía desde la $\langle 110 \rangle$ a la $\langle 111 \rangle$. Como también se puede observar, la distancia entre subbandas aumenta cuando se cambia la dirección de confinamiento de la forma anterior. Además, la curvatura de las subbandas también aumenta, con la consiguiente reducción en la masa efectiva en las mismas, de manera que la dirección de confinamiento $\langle 111 \rangle$ es la que presenta el valor más pequeño.

La subbanda de split-off representada en las figuras es independiente de la dirección de confinamiento, como consecuencia de que la banda de split-off se considera isótropa en el modelo presentado en este trabajo. No obstante, merece la pena indicar que la Figura 3.8 sugiere que esta subbanda podría desempeñar un papel más importante en el transporte cuando el confinamiento se realice en la dirección $\langle 100 \rangle$ y $\langle 110 \rangle$ que cuando éste sea en la $\langle 111 \rangle$. En este último caso, el mayor número de subbandas de huecos pesados por debajo del fondo de la subbanda de split-off podría provocar que la mayor parte de los portadores se concentrasen en las subbandas de pesados, quedando la subbanda de split-off prácticamente vacía. Este aspecto se analizará con más profundidad en la sección 4.3.3.

3.8 Paralelismo entre las soluciones de la ecuación de Schrödinger de masa efectiva y las soluciones de otros métodos de cálculo

Como se mencionó al comienzo de este trabajo, la banda de valencia tiene particularidades que la hacen más difícil de estudiar que la banda de conducción. La causa principal de tales características especiales es su degeneración. La existencia de tres bandas

distintas dentro de la banda de valencia y el acoplamiento que se produce entre ellas, junto con la particular anisotropía de las mismas, complican significativamente el cálculo de la estructura de bandas de los huecos en nanoestructuras.

Un método muy empleado por los autores para realizar investigaciones sobre la banda de valencia en nanoestructuras es el método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ [Rodríguez-Bolívar, 1999], [Rodríguez-Bolívar, 2000]. Este método proporciona estructuras de subbandas en dispositivos micro y nanométricos considerando los aspectos esenciales de la banda de valencia. No obstante, su implementación es más complicada y presenta problemas numéricos en la determinación de las subbandas como consecuencia de los cruces entre las mismas.

Por el contrario, los métodos expuestos en este trabajo no presentan problemas numéricos significativos y son relativamente sencillos de implementar. La principal ventaja de los mismos es el tiempo de cálculo, que se reduce significativamente con respecto a otros métodos.

La comparación de los resultados obtenidos en este trabajo y los correspondientes al método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ muestra diferencias que es necesario interpretar antes de proseguir este trabajo. La Figura 3.9 muestra ejemplos de relaciones $E_n(k_{\parallel})$ obtenidas por medio del método $\vec{k} \cdot \vec{p}$. Al margen de los valores numéricos de las mismas, un aspecto interesante que debe ser destacado es la existencia de grandes acercamientos entre las subbandas asociados a fuertes cambios del valor de sus masas efectivas. Una subbanda de huecos ligeros puede cambiar su masa efectiva hasta convertirse en una subbanda de huecos pesados en un corto intervalo de valores del módulo del vector de onda mientras que, recíprocamente, una subbanda de huecos pesados puede convertirse prácticamente en una banda de huecos ligeros en el mismo intervalo. Además, este fenómeno puede darse más de una vez dentro de una misma banda.

Como ya se ha mostrado en las figuras de resultados de los apartados previos, el método usado en este trabajo para calcular la estructura de subbandas en nanoestructuras no muestra este tipo de acercamientos entre subbandas, sino que en su lugar se observan cortes entre las subbandas. Esto es una consecuencia del desacoplamiento entre las subbandas que se asume en el presente tratamiento del problema. Sin embargo, es posible rectificar las relaciones $E_n(k_{\parallel})$ proporcionadas por el método desarrollado en este trabajo para obtener

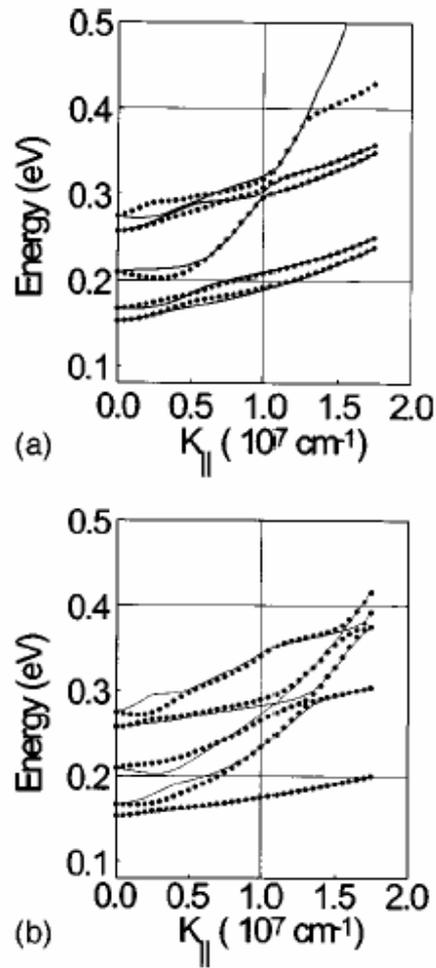


Figura 3.9: Ejemplos de relaciones $E_n(\vec{k}_{\parallel})$ en la dirección [100] (a) y [110] (b) en un MOSFET obtenidas usando el método $\vec{k} \cdot \vec{p}$. Apréciase las zonas donde dos bandas se aproximan hasta casi cruzarse [Rodríguez-Bolívar, 1999]

relaciones semejantes a las del método $\vec{k} \cdot \vec{p}$. Dicha rectificación consiste sencillamente en reordenar de menor a mayor los valores de la energía para cada valor del vector de onda y establecer que, para cada \vec{k}_{\parallel} , la subbanda n -ésima es aquella que tiene el n -ésimo valor de la energía. Así, la subbanda fundamental de la estructura es aquella que para cada vector de onda tiene el menor valor de la energía. Se denominará $\tilde{E}_n(\vec{k}_{\parallel})$ a la estructura de subbandas rectificadas. Esta interpretación de los resultados fue realizada anteriormente por otros autores que usaron modelos sencillos para el estudio de la estructura de subbandas de nanoestructuras de semiconductores [Crow, 2000].

La estructura de subbandas rectificadas es una herramienta de gran importancia en el estudio del transporte, ya que el campo eléctrico aplicado arrastra al portador dentro de una misma subbanda de esta estructura. Si se optase por emplear la estructura de subbandas sin rectificar para el transporte, los resultados obtenidos podrían presentar anomalías. Sin embargo, para otras aplicaciones, como el cálculo de las tasas de *scattering* o la densidad de estados, la estructura de subbandas sin rectificar puede seguir siendo muy útil. La principal ventaja de ésta última es que cada subbanda tiene un único carácter de hueco pesado, ligero o *split-off* y por este motivo es mucho más sencillo emplear $E_n(k_{\parallel})$ en el cálculo. Ya que físicamente los resultados de probabilidades de *scattering* y de densidad de estados serán idénticos usando una estructura de subbandas u otra, se propone emplear para el cálculo de las tasas de *scattering* la estructura de subbandas obtenida al resolver la ecuación de Schrödinger de masa efectiva, y emplear una estructura de subbandas rectificadas similar a la que proporciona el método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ para el transporte.

Capítulo 4

Densidad de estados y probabilidades de *scattering* 2-D

*Más veces descubrimos nuestra sabiduría con nuestros
disparates que con nuestra ilustración*

(Oscar Wilde)

4.1 Introducción

Para desarrollar un simulador de dispositivos nanométricos basado en el método Monte Carlo que considere los efectos cuánticos en el comportamiento de los portadores es necesario determinar la estructura de subbandas y las funciones envolventes. Estas magnitudes son necesarias para determinar la evolución del estado del portador causada por el arrastre del campo eléctrico y por los sucesos de *scattering*. Sin embargo, la estructura de subbandas que surge del estudio de la cuantización de la energía habitualmente es extraordinariamente complicada, ya que se tiene como resultado un elevado número de subbandas. No obstante, no todas contribuirán de igual manera a la dinámica de los portadores, puesto que hay subbandas que se encuentran muy pobladas y otras que están prácticamente vacías. Las primeras son las que marcan el comportamiento del dispositivo, y por tanto sería conveniente estimar cuáles son y usarlas en la simulación, despreciando el

resto. Un punto de partida para comenzar este estudio consiste en investigar la población de las subbandas en equilibrio y escoger para las simulaciones un conjunto de ellas que contenga un alto porcentaje del total.

Una vez que se haya escogido ese conjunto adecuado de subbandas, el siguiente paso es el cálculo de las probabilidades de *scattering* bidimensionales. El carácter bidimensional del portador cambiará de manera significativa el valor de las probabilidades de *scattering*. Además, será necesario incluir en el estudio nuevos mecanismos de *scattering* esencialmente bidimensionales, como es el caso de la rugosidad superficial, causada por las fluctuaciones del potencial electrostático debidas a las imperfecciones de la *interface* entre el óxido y el Si.

En el comienzo de este capítulo se calculan las densidades de estados de las subbandas para un perfil general de no parabolicidad siguiendo un procedimiento similar al desarrollado por López-Villanueva *et al.* [López-Villanueva, 1994]. Usando estas densidades se calculan las ocupaciones de las subbandas en estructuras orientadas en las direcciones cristalinas más importantes, y de esta forma se halla un conjunto adecuado con el que simular el comportamiento de los portadores. Finalmente, se procederá al desarrollo de las tasas de *scattering* bidimensionales, tanto con fonones como con la rugosidad superficial de la *interface*. Las tasas de *scattering* con impurezas ionizadas no han sido consideradas en este trabajo puesto que los actuales dispositivos basados en la tecnología SOI poseen bajos dopados, y por consiguiente este mecanismo de *scattering* no será tan importante en el estudio de la dinámica como los primeros.

4.2 Densidad de estados 2-D

La densidad de estados de un gas bidimensional es una magnitud de gran importancia para determinar la población de las subbandas. Asimismo, existe una estrecha relación entre esta densidad de estados y las tasas de *scattering* de los mecanismos bidimensionales, al igual que entre la densidad de estados tridimensional y las tasas de *scattering* de los mecanismos tridimensionales.

En este apartado se estudia, en primer lugar, la densidad de estados de la estructura de subbandas que se obtiene para una banda isotrópica y no parabólica. A continuación se adapta el resultado para aplicarlo a bandas anisótropas y no parabólicas.

Siguiendo un desarrollo paralelo al que muestra López Villanueva *et al.* [López-Villanueva, 1994], comenzamos este estudio a partir de la consideración de la estructura de subbandas de un pozo cuadrado infinito. Cada una de las subbandas de esta estructura está caracterizada por un cierto valor de k_z en su función envolvente $\psi(z)$, siendo los valores posibles de k_z aquellos que den lugar a una onda estacionaria en el pozo. La densidad de estados bidimensional, D_{2D} , se calcula a partir de

$$D_{2D} k_{\parallel} dk_{\parallel} d\epsilon = \frac{2}{(2\pi)^2} k_{\parallel} dk_{\parallel} d\epsilon \quad (4.1)$$

donde se ha tenido en cuenta la degeneración del espín. Para escribir la anterior ecuación en términos de la energía, se parte de la siguiente relación, obtenida a partir de la combinación de las ecuaciones (3.15) y (3.30)

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2 (k_{\parallel}^2 + k_z^2)}{2m_{H,L}} &= \frac{E - V}{\psi_{H,L}(E - V)} \\ \frac{\hbar^2 (k_{\parallel}^2 + k_z^2)}{2m_{so}} &= \frac{E - V - \epsilon_{so}}{\psi_S(E - V)} \end{aligned} \quad (4.2)$$

siendo V el valor del potencial en el fondo del pozo infinito. La primera igualdad se refiere a las subbandas obtenidas a partir de las bandas de huecos pesados y ligeros, mientras que la segunda es para aquellas subbandas que aparecen al cuantizar la banda de huecos *split-off*. Diferenciando en la ecuación (4.2) se obtiene la siguiente relación

$$\frac{\hbar^2}{m_{H,L,so}} \psi_{\parallel} k_{\parallel} + 2k_z \frac{dk_z}{dk_{\parallel}} \psi_{\parallel} dk_{\parallel} = \sqrt{\psi_{H,L,S}(E - V)} \psi_{H,L,S}(E - V) dE \quad (4.3)$$

En un pozo cuadrado infinito k_z es una constante para cada una de las subbandas. Al ser independiente del valor que tome k_{\parallel} , se tiene que $\frac{dk_z}{dk_{\parallel}} = 0$. Sin embargo, en un pozo general no existe un único valor de k_z para cada subbanda, sino que se tendrá en cada intervalo de la discretización espacial un valor distinto de este parámetro. El conjunto de los valores de k_z en cada uno de los intervalos marcará la forma de las funciones

envolventes $\psi(z)$. Si éstas no cambian apreciablemente a lo largo de la subbanda, se podría admitir que tampoco cambiarán notablemente los valores de k_z de cada intervalo, y por consiguiente $\frac{dk_z}{dk_{\parallel}} \approx 0$. Esta circunstancia fue analizada en el apartado 3.6 y como ejemplo la

Figura 3.6 muestra que la variación de la función envolvente a lo largo de la subbanda puede considerarse despreciable. Usando esta aproximación, la ecuación (4.3) se puede simplificar, obteniéndose

$$\frac{\hbar^2}{m_{H,L,so}} k_{\parallel} dk_{\parallel} = \sqrt{\psi_{H,L,S}(E-V)} \psi_{H,L,S}(E-V) dE \quad (4.4)$$

Sustituyendo en la ecuación (4.1) e integrando en la coordenada angular se obtiene

$$D_{2D} dE = \frac{m_{H,L,so}}{\pi \hbar^2} \sqrt{\psi_{H,L,S}(E-V)} \psi_{H,L,S}(E-V) dE \quad (4.5)$$

De esta manera, la densidad de estados bidimensional en la subbanda n del pozo cuadrado infinito es

$$D_{2D,n}(E) = \frac{m_{H,L,so}}{\pi \hbar^2} \sqrt{\psi_{H,L,S}(E-V)} \psi_{H,L,S}(E-V) \quad (4.6)$$

Esta relación es la generalización del trabajo de López-Villanueva *et al.* [López-Villanueva, 1994] para un perfil de no parabolicidad general.

Por último, y con el propósito de extender la anterior expresión para un pozo general, se lleva a cabo una aproximación expuesta en el anterior trabajo citado, en el que sustituye el valor del potencial electrostático en el fondo del pozo por el valor promedio del potencial que experimentan los portadores de la subbanda n , V_n , que se calcula a partir de

$$V_n = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(z) V(z) \psi_n(z) dz \quad (4.7)$$

y de esta manera finalmente se obtiene

$$D_{2D,n}(E) = \frac{m_{H,L,so}}{\pi \hbar^2} \sqrt{\psi_{H,L,S}(E-V_n)} \psi_{H,L,S}(E-V_n) \quad (4.8)$$

Cuando se considera una banda anisótropa, la única modificación que se debe llevar a cabo en la anterior expresión es que la masa efectiva sea la de la densidad de estados bidimensional en el plano paralelo, m_{\parallel} , calculada como se muestra en la ecuación (3.41).

4.2.1 Relación entre densidades de estados 2D y 3D

El confinamiento de los portadores en un pozo cuadrado infinito es la causa por la que se produce la cuantización de k_z y su comportamiento como un gas bidimensional. Cuando este confinamiento desaparece y se hace tender a infinito la anchura del pozo, L , el gas de nuevo vuelve a ser tridimensional. Una forma de comprobar la idoneidad de la anterior densidad de estados bidimensional es buscar la conexión entre la misma y la densidad de estados tridimensional. Para un pozo cuadrado infinito con un potencial electrostático $V=0$ la densidad de estados bidimensional de la subbanda n es

$$D_{2D,n}(E) = \frac{m}{\pi\hbar^2} \sqrt{\epsilon(E)} \epsilon(E) \quad (4.9)$$

No se ha particularizado la expresión para ningún tipo de hueco, ya que como se puede observar en la ecuación (4.8) esta expresión es común para las subbandas de huecos pesados, ligeros y split-off. Para calcular la densidad de estados en función de la energía de todas las subbandas de un determinado tipo de hueco es necesario considerar que entre el fondo del pozo y la energía del fondo de la primera subbanda, E_0 , la densidad de estados es nula. Entre la energía del fondo de la primera subbanda y el fondo de la segunda, E_1 , la densidad de estados del conjunto de subbandas es $\frac{m}{\pi\hbar^2} \sqrt{\epsilon(E)} \epsilon(E)$. Entre la energía del fondo de segunda subbanda y el fondo de la tercera, E_2 , hay dos subbandas contribuyendo a la densidad de estados, y ya que la misma sólo depende de la energía total, ambas contribuirán de igual manera, y por consiguiente la densidad de estados será $\frac{2m}{\pi\hbar^2} \sqrt{\epsilon(E)} \epsilon(E)$. En general, para la estructura de subbandas se tendrá

$$D_{2D}(E) = \begin{cases} 0 & E < E_0 \\ \frac{m}{\pi\hbar^2} \sqrt{\epsilon(E)} \epsilon(E) & E_0 < E < E_1 \\ \frac{2m}{\pi\hbar^2} \sqrt{\epsilon(E)} \epsilon(E) & E_1 < E < E_2 \\ \vdots & \vdots \\ \frac{nm}{\pi\hbar^2} \sqrt{\epsilon(E)} \epsilon(E) & E_{n-1} < E < E_n \end{cases} \quad (4.10)$$

Ya que cada una de las subbandas viene caracterizada por un valor de k_z , y este valor a su vez está cuantizado según $k_z = \frac{n\pi}{L}$ para tener una onda estacionaria en el pozo, podemos sustituir n en la expresión de la densidad de estados bidimensional de la estructura de subbandas, obteniéndose

$$D_{2D}(E) = \frac{Lk_z m}{\pi^2 \hbar^2} \sqrt{\rho(E)} \quad (4.11)$$

Esta ecuación resume la ecuación (4.10) cuando se usa el valor de k_z de la última banda incorporada. Si eliminamos el confinamiento de los portadores, k_z se vuelve continua y puede tomar cualquier valor, que se puede relacionar con el valor de la energía a partir de

$$k_z = \begin{cases} \sqrt{\frac{2m_{H,L}E}{\hbar^2 \rho_{H,L}(E)}} & \text{Huecos pesados y ligeros} \\ \sqrt{\frac{2m_{so}[E - \rho_{so}]}{\hbar^2 \rho_s(E)}} & \text{Huecos split - off} \end{cases} \quad (4.12)$$

La densidad de estados ahora no será de tipo bidimensional sino tridimensional, por lo que para poder hablar con propiedad de número de estados por unidad de volumen del espacio K es necesario dividir la densidad de estados de la ecuación (4.11) por la longitud del cristal en la antigua dirección de confinamiento. Efectuando las sustituciones en la ecuación (4.11) tenemos la densidad de estados tridimensional

$$D_{3D}(E) = \begin{cases} \frac{\sqrt{2m_{H,L}^{3/2}}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} \rho_{H,L}(E) & \text{Huecos pesados y ligeros} \\ \frac{\sqrt{2m_{so}^{3/2}}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - \rho_{so}} \rho_s(E) & \text{Huecos split - off} \end{cases} \quad (4.13)$$

4.3 Un estudio sobre la selección de un conjunto adecuado de subbandas para la simulación

Cuando se resuelve la ecuación de Schrödinger de masa efectiva para encontrar los estados ligados del sistema en la dirección de confinamiento se obtiene un gran número de subbandas cuyo manejo puede ser una tarea muy costosa computacionalmente. Además,

cuando se tiene en cuenta un gran número de subbandas es necesario evaluar muchas tasas de *scattering* intra e intersubbanda y mantenerlas almacenadas, ocupando así grandes cantidades de memoria. El número de tasas de *scattering* que es necesario calcular crece como el cuadrado del número de subbandas incluidas en la estructura, por lo que resulta fundamental que ésta no contenga demasiadas. Es por esto por lo que se prefiere usar una estructura que incluya únicamente aquellas subbandas que sean las más representativas para el estudio del transporte [Imanaga, 1991]. Una forma de abordar el problema de la determinación de cuáles son las de mayor importancia es mediante el cálculo de la población relativa de las mismas en equilibrio. Resulta razonable suponer que aquellas que contengan un número mayor de portadores influirán en mayor medida en el comportamiento de todo el gas, siendo despreciable la influencia del resto en el transporte. El estudio de la población relativa de las subbandas más sencillo de realizar es el que considera al sistema en equilibrio, ya que la ocupación de éstas será en este caso la que proporciona la estadística de Maxwell-Boltzmann o la de Fermi-Dirac, usándose una u otra dependiendo del nivel de dopado del semiconductor. No obstante, en el caso de un transistor de tipo FET, para campos eléctricos longitudinales muy altos es posible que comiencen a poblarse significativamente subbandas que en equilibrio se encuentran prácticamente vacías, y por tanto una elección por medio de este procedimiento podría provocar que los fenómenos de portadores calientes no se manifestasen en las simulaciones. Aún así, el procedimiento constituye una buena aproximación de partida para llevar a cabo el estudio.

En esta sección vamos a usar dos métodos ligeramente diferentes para estimar un conjunto de subbandas adecuado para realizar la descripción del comportamiento de los portadores en el semiconductor. El primero de ellos se basa en las ideas de Imanaga *et al.* [Imanaga, 1991]. Estos autores resolvieron la ecuación de Schrödinger para obtener la estructura de subbandas en una estructura MOS, y de la misma tomaron un conjunto de las de menor energía, considerando como estados de tipo tridimensional a aquellos que quedasen por encima de la energía del fondo de la primera subbanda despreciada, E_{th} . Esta alternativa resulta muy útil cuando se pretende trabajar con un número reducido de subbandas, ya que la consideración de los estados tridimensionales suple la falta de información sobre las de mayor energía.

La población relativa de huecos contenida en un cierto conjunto de subbandas, esto es, el porcentaje de huecos para los que en el simulador se tendrán en cuenta sus características bidimensionales, se calcula a partir de la expresión

$$r \square \frac{\int_{E_{Min}}^{E_{th}} e^{-E/k_B T} \sum_{j=H,L,S} \sum_{i=1}^{M_j(E)} D_{j,i}(E) dE}{\int_{E_{Min}}^{\infty} e^{-E/k_B T} \sum_{j=H,L,S} \sum_{i=1}^{N_j(E)} D_{j,i}(E) dE} \times 100 \% \quad (4.14)$$

siendo E_{Min} la mínima energía de la estructura de subbandas, $D_{j,i}(E)$ la densidad de estados bidimensional de la subbanda i -ésima obtenida a partir de la cuantización de la banda de huecos de tipo j , $N_H(E)$, $N_L(E)$ y $N_S(E)$ son el número de subbandas de huecos pesados, ligeros y *split-off* de la estructura que tienen su fondo por debajo de una cierta energía E , y $M_H(E)$, $M_L(E)$ y $M_S(E)$ es el mismo concepto, aunque aplicado únicamente para aquellas contenidas en el conjunto de estudio, por lo que se satisfará la relación $M_j(E) \leq N_j(E)$. La estadística de Maxwell-Boltzmann se ha usado para tener en cuenta la ocupación de las subbandas. Ésta es válida puesto que el estudio realizado es para bajas concentraciones de impurezas y campos eléctricos bajos o moderados. Para valores del campo eléctrico muy altos se recomienda usar la estadística de Fermi-Dirac. La integración del denominador debería llevarse a cabo, en teoría, hasta una energía infinita, si bien se puede obtener una excelente aproximación numérica de la integral integrando hasta una energía para la que la población de las bandas sea despreciable. Para la mayoría de los casos prácticos 1 eV es suficiente.

El segundo método consiste en la selección de las subbandas más representativas para el transporte de portadores sin considerar el resto de portadores como tridimensionales. Para alcanzar una descripción comparable con el método anterior, este segundo método necesitará usar un número mayor de subbandas de la estructura. En este método no existe una energía E_{th} , y los estados son considerados como bidimensionales dentro de la subbanda entera, aunque se alcance energías mayores que la del fondo de la primera subbanda despreciada. Por ello, el porcentaje de portadores en el conjunto de subbandas considerado será

$$r \square \frac{\int_{E_{Min}}^{\infty} e^{-E/k_B T} \sum_{j=H,L,S} \sum_{i=1}^{M_j(E)} D_{j,i}(E) dE}{\int_{E_{Min}}^{\infty} e^{-E/k_B T} \sum_{j=H,L,S} \sum_{i=1}^{N_j(E)} D_{j,i}(E) dE} \times 100 \% \quad (4.15)$$

Con el propósito de mostrar los resultados obtenidos cuando se aplica cada método, en el presente estudio se usará el primero de ellos en el estudio de la determinación de las subbandas más relevantes en el transporte de huecos cuando se desprecia la anisotropía de la banda de valencia en la resolución de la ecuación de Schrödinger de masa efectiva. El segundo método será empleado en el estudio de la determinación de las subbandas más relevantes en el transporte de huecos cuando se tenga en cuenta la anisotropía de la banda de valencia en la resolución de la ecuación de Schrödinger de masa efectiva siguiendo el procedimiento desarrollado en la sección 3.7.

4.3.1 El modelo

Como ejemplo vamos a estudiar una estructura SOI (*Silicon on Insulator*) modelada como un potencial triangular infinito con un campo eléctrico uniforme dentro del semiconductor, Figura 4.1. A la capa de Si se le asignó un espesor de 10 nm, y se despreció el dopado en la misma. Se realizó una investigación de la población relativa de las subbandas en equilibrio para campos eléctricos entre 1 kV/cm y 100 kV/cm, de acuerdo con los valores típicos que se pueden encontrar en este tipo de dispositivos. Este modelo proporciona una visión cualitativa suficientemente precisa de un dispositivo FD/SOI, (*Fully Depleted Silicon on Insulator*).

Para simular el transporte de los portadores en esta estructura es recomendable tener en cuenta el *scattering* con fonones y el *scattering* debido a la rugosidad superficial con la puerta y con el óxido enterrado, considerándose que la rugosidad superficial será un mecanismo que únicamente afectará a los portadores bidimensionales. Este aspecto, y que será tratado con más profundidad más adelante en este capítulo. De esta manera, para un conjunto de n subbandas, el número de procesos de *scattering* distintos, y por tanto el número de matrices de *scattering* que sería necesario calcular, es $6(n+2)(n+3)$ cuando se

aplica el método de Imanaga *et al.* y $6n^2$ cuando se aplica el segundo método de selección de subbandas, como a continuación se demuestra.

Según el primer método, la estructura de subbandas estará formada por las n subbandas seleccionadas más las bandas de huecos pesados, ligeros y *split-off* donde los portadores tendrán carácter tridimensional. Atendiendo a las transiciones asistidas por fonones ópticos, ya que existen dos alternativas diferentes de pasar de una banda determinada a otra, a saber, por absorción o emisión, será necesario considerar un total de $2(n+3)^2$ transiciones distintas. El mismo número es también aplicable a las transiciones asistidas por fonones acústicos. Con respecto al *scattering* debido a la rugosidad superficial, éste únicamente se producirá entre las n subbandas de portadores bidimensionales, y por el carácter elástico de la transición no existirán tasas de absorción y emisión como en el caso de los fonones, sino una única tasa de *scattering* para pasar de una banda a otra. No obstante, en una estructura SOI es necesario considerar como mecanismos de *scattering* tanto la rugosidad de la *interface* óxido de puerta-Si como la de la *interface* óxido enterrado-Si. Así pues la rugosidad superficial será responsable de $2n^2$ transiciones distintas. Como ya se indicó, esto da lugar a $6(n+2)(n+3)$ matrices de *scattering* que han de ser consideradas en la simulación.

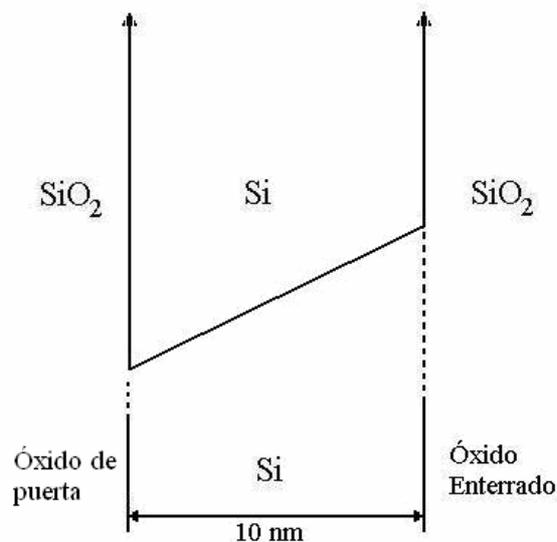


Figura 4.1: Modelo simplificado de la estructura SOI de 10 nm de espesor.

Con respecto al segundo método de selección de subbandas, el cálculo difiere del anterior en que son $2n^2$ el número de transiciones distintas asistidas por fonones ópticos (o acústicos) en vez de $2(n+3)^2$, de donde se deduce que serán necesarias $6n^2$ matrices de *scattering* para el estudio.

En las siguientes secciones se intentará determinar un conjunto adecuado de subbandas para el estudio de la dinámica de los huecos en este tipo de dispositivos cuando se desprecia la anisotropía de la banda de valencia en la resolución de la ecuación de Schrödinger y cuando ésta se tiene en cuenta. En éste último caso se podrá observar la influencia que tiene la orientación cristalina de la dirección de confinamiento en la población relativa de las subbandas de la estructura.

La integración hasta una energía infinita en las ecuaciones (4.14) y (4.15) implica el conocimiento de la estructura de subbandas completa, algo que en la mayoría de los casos prácticos es una tarea imposible. Por ello resolveremos la ecuación de Schrödinger de masa efectiva para el modelo hasta una energía de 1 eV, suponiendo que esta energía es suficientemente grande como para ser considerada como el límite superior de las integrales.

4.3.2 Banda isótropa y no parabólica

Para comenzar se resolvió la ecuación de Schrödinger de masa efectiva descrita en la sección 3.5 usando la aproximación isótropa, y se obtuvo la estructura de subbandas hasta 1 eV. La Figura 4.2 muestra la energía de los fondos de las subbandas de menor energía en función del campo eléctrico. En esta figura se aprecia que a partir de 10 kV/cm aproximadamente los fondos de las bandas incrementan su energía como consecuencia del mayor confinamiento al que son sometidos por el campo. También cabe destacar en esta figura la tendencia general de mantener el mismo orden de las subbandas. Sólo en muy raras circunstancias un fondo de una subbanda incrementa su energía hasta valores que superen al del fondo de una subbanda que a campos inferiores se encontraba por encima de la primera. Estas situaciones excepcionales pueden acontecer en aquellos casos de subbandas de fondos de energía muy similar a muy bajos campos. Un caso de este tipo se observa en la figura con la primera subbanda de tipo *split-off* y la segunda subbanda de los

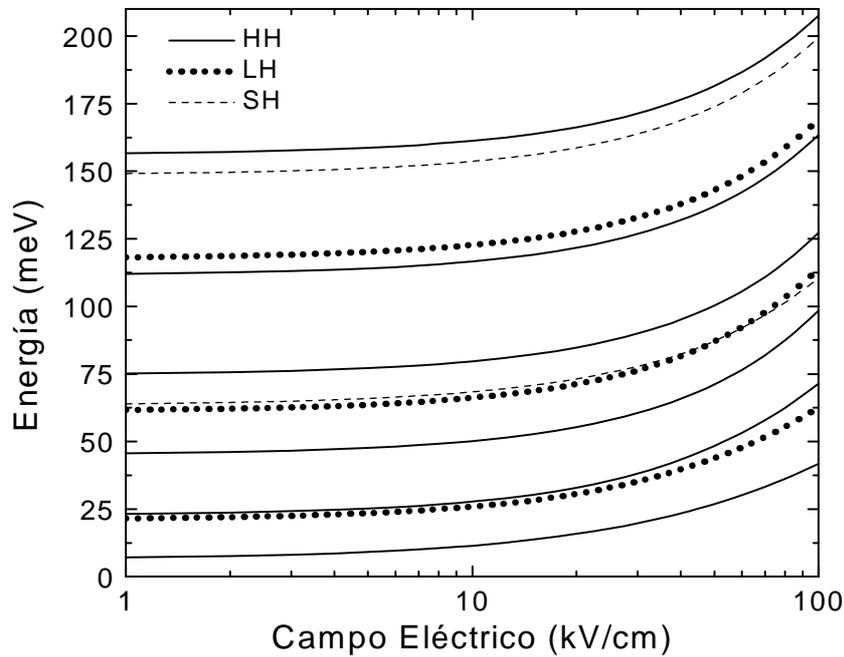


Figura 4.2: Fondo de las subbandas de menor energía de la estructura de la Figura 4.1 en función del campo eléctrico aplicado.

huecos ligeros.

Se tomaron varios conjuntos de subbandas designados por tres cifras: la primera indicando el número de subbandas de huecos pesados; la segunda, el número de ligeros y la tercera de la terna, el número de subbandas de *split-off* del conjunto. Por ejemplo, la terna 321 indica que se tomaron las tres subbandas de energías más bajas de huecos pesados, las dos subbandas de energías más bajas de huecos ligeros y la de energía más baja de los huecos *split-off*. Realizamos un estudio a 77 K y 300 K. La Figura 4.3 recoge los resultados de los cálculos llevados a cabo usando la ecuación (4.14).

Una observación importante sobre la población relativa de los conjuntos de subbandas es que, en aquellos en los que se considera un número pequeño de subbandas, la población relativa de los mismos es significativamente dependiente del campo eléctrico transversal, mientras que los conjuntos que contienen un número mayor de subbandas tienen una población relativa que es prácticamente independiente del campo.

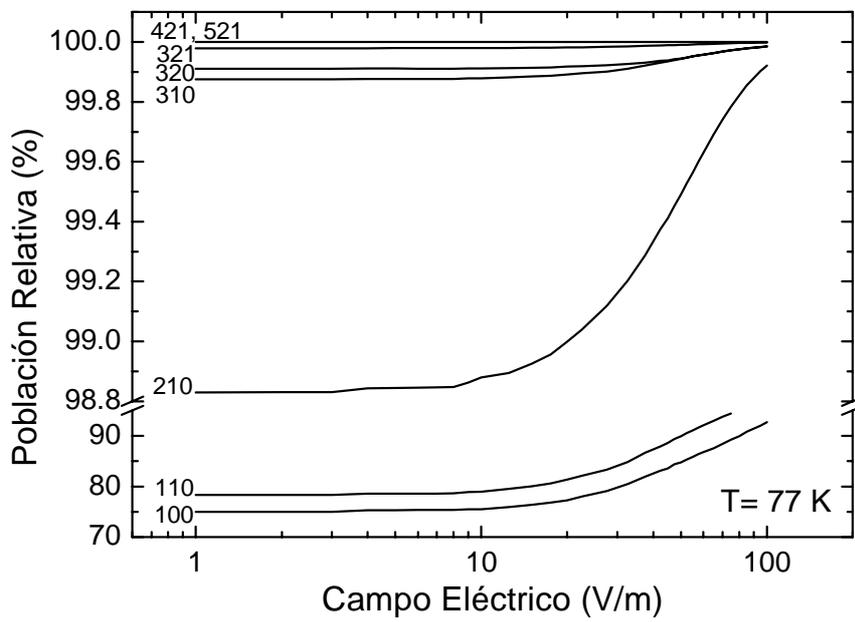
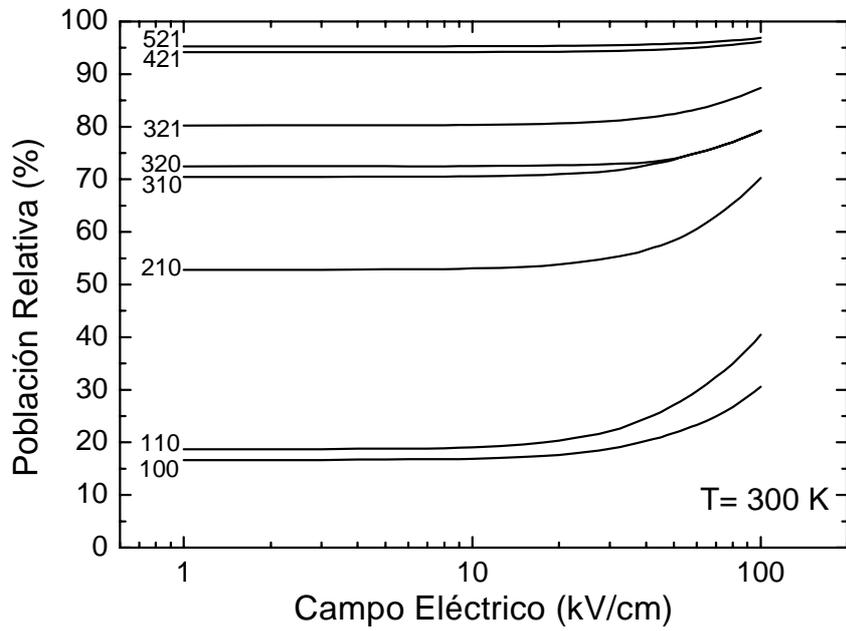


Figura 4.3: Población relativa de varios conjuntos de subbandas de bajas energías en función del campo eléctrico aplicado a 300 K (arriba) y 77 K (abajo).

Como resultado de este estudio se sugiere como una opción adecuada tomar el conjunto 310, ya que este conjunto contiene más del 70% de los portadores a 300 K y casi el 100% a 77 K. Este conjunto junto con los estados de tipo tridimensional cuando el portador supera la energía del fondo de la segunda banda de ligeros se puede manejar sin dificultad en el simulador Monte Carlo, ya que implica usar 252 matrices de *scattering*, que es un número aceptable.

No obstante, esta elección podría resultar insuficiente para la descripción del problema cuando se pretende hacer un estudio para campos longitudinales altos, donde las subbandas de mayor energía se pueblan y manifiestan sus características bidimensionales. Por ello, otra alternativa sería el conjunto 421, que contiene más del 94% de los portadores a 300 K y prácticamente todos los portadores a 77 K. Este conjunto implica el uso de una estructura de subbandas más completa que el anterior, y considerando los mismos mecanismos de *scattering* bidimensionales citados anteriormente se necesitarían 540 matrices. Este número aún sigue siendo un valor manejable en un simulador, y por tanto, es otra elección que puede resultar adecuada para el problema que se ha considerado.

4.3.3 Banda anisótropa y no parabólica

En este apartado llevamos a cabo un estudio similar al anterior, pero considerando la anisotropía de la banda de valencia en la ecuación de Schrödinger de masa efectiva de la manera en que se detalló en la sección 3.7. Además, haremos uso de la segunda técnica de determinación de las subbandas más relevantes en el transporte, despreciando la contribución de los estados del portador de tipo tridimensional.

Resolvimos la ecuación de Schrödinger de masa efectiva en el sistema de la Figura 4.1 tomando como dirección de confinamiento las direcciones $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ y $\langle 111 \rangle$. En cada uno de los casos la estructura de subbandas que se encontró fue diferente. De acuerdo con los resultados mostrados en la sección 3.7, en términos generales observamos que cuando el confinamiento cambia de la dirección $\langle 100 \rangle$ a $\langle 110 \rangle$ y de la dirección $\langle 110 \rangle$ a $\langle 111 \rangle$ las subbandas de huecos ligeros se sitúan a energías cada vez más altas, mientras que el caso opuesto se observa para las subbandas de huecos pesados. La explicación de este hecho está

en la anisotropía: una masa efectiva mayor en la dirección de confinamiento da lugar a una disminución en la energía del fondo de la banda. Los huecos ligeros disminuyen su masa efectiva cuando nos movemos de la dirección $\langle 100 \rangle$ a la $\langle 110 \rangle$ y de la dirección $\langle 110 \rangle$ a la $\langle 111 \rangle$, y el comportamiento inverso es el observado en los huecos pesados.

Calculamos la población relativa en varios conjuntos de subbandas usando la ecuación (4.15) para campos eléctricos entre 1 kV/cm y 100 kV/cm y representamos los resultados en la Figura 4.4. Los conjuntos fueron generados atendiendo al orden de las subbandas de la estructura, incorporando sucesivamente subbandas de mayor energía.

De nuevo aquí se puede observar que en los conjuntos que contienen un número pequeño de subbandas existe una importante dependencia de la población relativa con el campo eléctrico transversal, mientras que esta dependencia desaparece prácticamente cuando se incorpora un número mayor de subbandas al conjunto.

Un ejemplo de la variabilidad de los conjuntos adecuados de subbandas cuando se cambia la dirección de confinamiento se puede extraer de la Figura 4.4. Para un dispositivo fabricado con la dirección de confinamiento $\langle 100 \rangle$ se puede admitir como válido el conjunto 331 para llevar a cabo simulaciones fiables. No obstante, este conjunto desprecia la cuarta y quinta subbanda de huecos pesados, que contienen aproximadamente el 10% del total de portadores cuando el dispositivo se fabrica con la dirección de confinamiento $\langle 111 \rangle$.

Considerando los resultados anteriores intentamos encontrar un conjunto de subbandas para ser usado para cualquier dirección de confinamiento. En la Figura 4.4 podemos observar que las cuatro subbandas de menor energía de los huecos pesados siempre presentan una población significativa. La quinta subbanda de huecos pesados no desempeña un papel tan importante cuando la dirección de cuantización es la $\langle 100 \rangle$. No obstante, la incluiremos en el conjunto de subbandas porque sí lo es en las otras dos direcciones de cuantización. Algo similar ocurre para los huecos ligeros. La primera y segunda subbanda de menor energía de este tipo de huecos contienen una cantidad relativamente importante de portadores para todas las direcciones de cuantización. Sin embargo, cuando la dirección de cuantización es la $\langle 100 \rangle$, la tercera subbanda también se

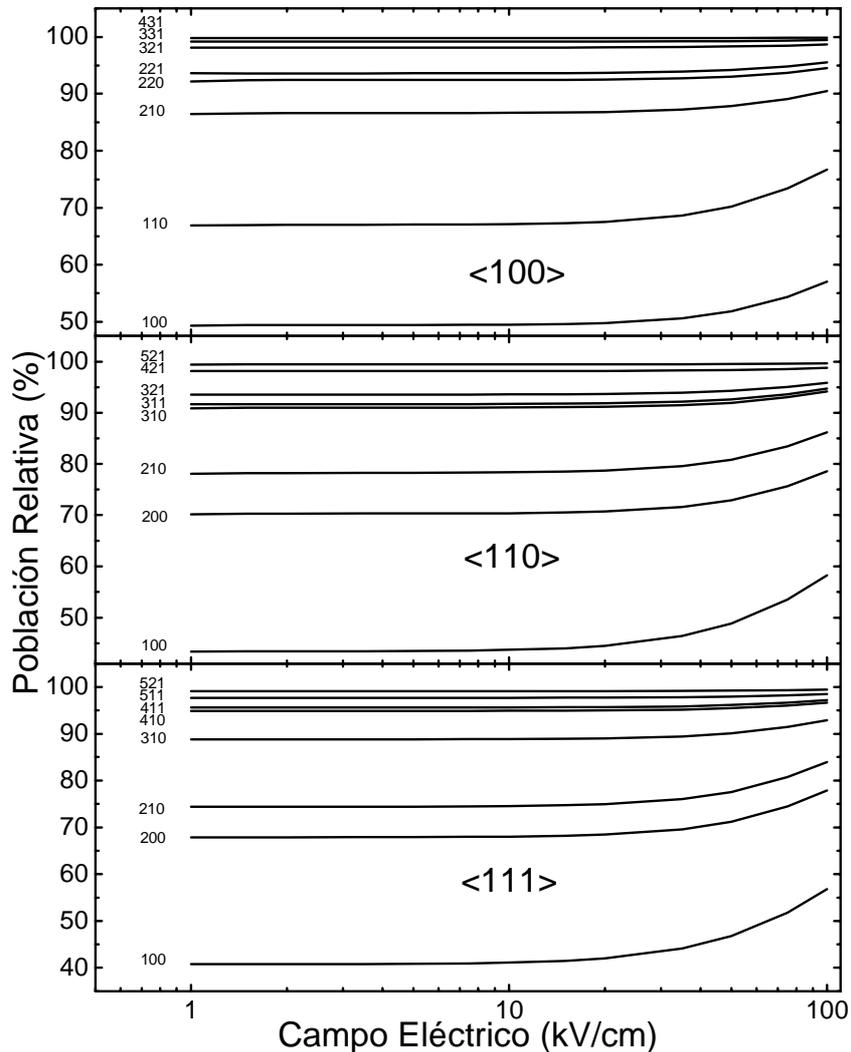


Figura 4.4: Población relativa de los conjuntos de subbandas de energías más bajas en la estructura indicada en la Figura 4.1 en función del campo eléctrico aplicado. Cada panel se refiere a un caso distinto en el que la dirección de confinamiento es la indicada.

encuentra poblada con un porcentaje de huecos relativamente importante. Por ello incluiremos las tres subbandas de menor energía de huecos ligeros en el conjunto para poder describir adecuadamente el comportamiento físico de la estructura SOI para todas las direcciones de confinamiento. En todos los casos la subbanda de menor energía de los huecos *split-off* desempeña un papel relativamente importante, y se incluirá en el conjunto

de subbandas por su posible interés cuando se apliquen campos eléctricos longitudinales medios y altos.

Por consiguiente, nuestra propuesta es usar el conjunto 531. Éste contiene más del 99% de los portadores a temperatura ambiente para cualquier dirección de confinamiento y en todo el rango estudiado de campos eléctricos transversales. Por tanto, será un excelente conjunto para el estudio de la dinámica de los huecos en dispositivos SOI. Además, a temperaturas más bajas la población relativa se hace aún más próxima al 100%, por lo que resulta razonable que se puedan llevar a cabo simulaciones muy fiables a bajas temperaturas con este conjunto. Con poblaciones relativas tan altas en este conjunto es posible despreciar la contribución de los estados tridimensionales.

En cuanto a las matrices de *scattering* necesarias para efectuar simulaciones con este conjunto de subbandas, dado que se han seleccionado $n=9$ subbandas, el número total de matrices es 486. De esta manera el uso de este conjunto de subbandas resulta más ventajoso desde el punto de vista de la cantidad de memoria requerida para almacenar datos que la combinación de estados bidimensionales y tridimensionales propuesto por Imanaga.

4.3.4 Conclusiones

Del estudio realizado sobre la determinación de un conjunto adecuado de subbandas para describir fiablemente el comportamiento físico de los huecos en una estructura SOI de dimensiones nanométricas podemos obtener una serie de conclusiones:

El procedimiento que combina estados bidimensionales y tridimensionales puede ser una forma adecuada de describir el problema del transporte en estructuras SOI haciendo uso de un número aceptable de matrices de *scattering*. También el que usa únicamente estados bidimensionales puede dar un conjunto de subbandas que contiene un elevado número de portadores en equilibrio usando un número similar de matrices de *scattering*, con la principal ventaja de que el comportamiento bidimensional de los portadores se tiene en cuenta en la simulación de la dinámica de los huecos en estructuras SOI.

La elección de un conjunto de nueve subbandas para el estudio de la dinámica de los huecos despreciando la contribución de los estados tridimensionales es adecuada para

cualquier dirección de confinamiento y para todo el rango de valores típicos del campo eléctrico transversal aplicado en un dispositivo de tipo SOI de dimensiones nanométricas. El estudio realizado para una estructura con una lámina de Si de 10 nm conduce a esta conclusión. No obstante, cuando se reduzca el espesor de la lámina hasta unos cuantos nm para simular los dispositivos en los que actualmente se está investigando, las subbandas incrementarán su energía como consecuencia del mayor confinamiento, y el conjunto de nueve subbandas puede dar una descripción del comportamiento del dispositivo mucho mejor, pudiendo describir incluso los efectos de portadores calientes cuando se aplica un valor alto del campo eléctrico longitudinal.

4.4 Tasas de scattering bidimensionales. Scattering con fonones

El punto de partida para calcular las tasas de *scattering* de un cierto mecanismo es la Regla de Oro de Fermi, que fue presentada en el Capítulo 2. La principal diferencia que existe entre los mecanismos de *scattering* tridimensionales y bidimensionales se encuentra en la forma de la función de onda del estado del portador, que en la dirección de confinamiento presenta una forma distinta a una onda plana. Teniendo en cuenta las características bidimensionales de los portadores, en este apartado se desarrollará el cálculo de las tasas de *scattering* con fonones ópticos y acústicos.

La expresión de la probabilidad de *scattering* por unidad de tiempo para un mecanismo asociado a una perturbación del hamiltoniano del cristal H' es

$$P(\mathbf{k}, c; \mathbf{k}', c') = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}', c' | H' | \mathbf{k}, c \rangle|^2 \delta(E' - E_m \pm \hbar\omega) \quad (4.16)$$

donde $\hbar\omega$ es la energía absorbida o emitida en la transición. Al igual que en el caso tridimensional, se acepta que el estado del sistema $|\mathbf{k}, c\rangle$ puede escribirse como un producto del estado del cristal $|c\rangle$ por el estado del portador $|\mathbf{k}\rangle$, siendo este último es un autoestado del operador hamiltoniano que considera el potencial confinante. El siguiente

paso consiste en expandir la perturbación del hamiltoniano en serie de Fourier, obteniéndose

$$H'(\vec{r}) = \frac{(2\pi)^{3/2}}{V} \sum_{\vec{q}} H'(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \quad (4.17)$$

Se usa este desarrollo en la ecuación (4.16) para obtener el elemento de matriz

$$\langle \psi', c' | H' | \psi, c \rangle = \frac{(2\pi)^{3/2}}{V} \sum_{\vec{q}} \langle c' | H'(\vec{q}) | c \rangle \int \psi'^*(\vec{r}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \psi(\vec{r}) d\vec{r} \quad (4.18)$$

siendo $d\vec{r}$ el diferencial de volumen del espacio real y $\psi'(\vec{r})$ y $\psi(\vec{r})$ las funciones de onda del portador en el estado inicial y final respectivamente, que contienen la información relativa al confinamiento bidimensional. La estructura de las mismas es en este caso:

$$\psi(\vec{r}) = \sqrt{\frac{l_{c.u.}}{N_{\parallel}}} u_{i,0}(\vec{r}) e^{i\vec{k}_{\parallel}\cdot\vec{r}} \psi(z) \quad (4.19)$$

siendo $l_{c.u.}$ la longitud de la celda unidad en la dirección de confinamiento y N_{\parallel} es el número de celdas unidad en el plano perpendicular a la dirección de confinamiento. En el apéndice B se muestra el cálculo del factor de normalización $\sqrt{\frac{l_{c.u.}}{N_{\parallel}}}$. De acuerdo con el

Teorema de la Masa Efectiva [Luttinger, 1955a], la función de onda del estado contiene la función de Bloch en el fondo de la banda $u_{i,0}(\vec{r})$. El subíndice cero indica que es la correspondiente al vector de onda $\vec{k} = 0$, donde se encuentran los extremos de las bandas, y el subíndice i se refiere a la banda a la que corresponde. La consideración de las funciones de Bloch $u_{i,0}(\vec{r})$ en la función de onda del estado, aunque es necesaria en el cálculo de las tasas de *scattering* como se verá a continuación, no debe ser tomada en cuenta como algo exacto, sino más bien como una forma aproximada de incorporar dentro de la función de onda del estado los efectos del potencial de la red de átomos de la manera más precisa que permite la teoría. En este sentido otros autores [Crow, 2000] han comprobado que la consideración exacta de las funciones $u_{i,0}(\vec{r})$ en la función de onda del estado conduciría a unas reglas de selección en las transiciones intra e intersubbanda que proporcionan resultados anómalos en el estudio del transporte.

Cuando se introduce la estructura de la función de onda del portador en la ecuación (4.18) se obtiene

$$\langle \psi', c' | H' | \psi, c \rangle = \frac{(2\pi)^{3/2}}{V} \frac{l_{c.u.}}{N_{\parallel}} \sum_{\vec{q}} \langle c' | H'(\vec{q}) | c \rangle \times \int u_{f,0}^*(\vec{r}) u_{i,0}(\vec{r}) e^{-i[\vec{k}_{\parallel} - \vec{k}_{\parallel} - \vec{q}_{\parallel}] \cdot \vec{r}_{\parallel}} e^{iq_z \cdot z} \psi_f^*(z) \psi_f(z) d\vec{r} \quad (4.20)$$

siendo i y f las subbandas inicial y final en la transición, respectivamente. Se ha sustituido el vector \vec{q} por una suma de su componente en la dirección de confinamiento, \vec{q}_{\parallel} , más su componente en el plano perpendicular a ésta, \vec{q}_{\perp} . Además, se ha usado la siguiente identidad: $\vec{r} = \vec{r}_{\parallel} + z\hat{k}$, siendo \hat{k} el vector unitario del eje Z del sistema de coordenadas cartesianas. Para poder simplificar la anterior integral se proponen los siguientes cambios de variable: $\vec{r}_{\parallel} = \vec{R}_{\parallel} + \vec{r}_{\parallel}''$; $z\hat{k} = R_z\hat{k} + r_z''\hat{k}$, siendo \vec{R}_{\parallel} y $R_z\hat{k}$ vectores de la red directa y \vec{r}_{\parallel}'' y $r_z''\hat{k}$ vectores que variarán dentro de la celda unidad. La intención de estos cambios de variable es reducir la integral en todo el espacio a integrales en la celda unidad. Introduciendo los cambios de variable, obtenemos

$$\int u_{f,0}^*(\vec{r}) u_{i,0}(\vec{r}) e^{-i[\vec{k}_{\parallel} - \vec{k}_{\parallel} - \vec{q}_{\parallel}] \cdot \vec{r}_{\parallel}} e^{iq_z \cdot z} \psi_f^*(z) \psi_f(z) d\vec{r} = \sum_{\vec{R}_{\parallel}} \sum_{R_z} \int_{c.u.} u_{f,0}^*(\vec{R}_{\parallel} + R_z\hat{k} + \vec{r}_{\parallel}'' + r_z''\hat{k}) u_{i,0}(\vec{R}_{\parallel} + R_z\hat{k} + \vec{r}_{\parallel}'' + r_z''\hat{k}) \times e^{-i[\vec{k}_{\parallel} - \vec{k}_{\parallel} - \vec{q}_{\parallel}] \cdot [\vec{R}_{\parallel} + \vec{r}_{\parallel}']} e^{iq_z \cdot [R_z + r_z'']} \psi_f^*(R_z + r_z'') \psi_f(R_z + r_z'') d\vec{r}_{\parallel}'' dr_z'' \quad (4.21)$$

Siendo $d\vec{r}_{\parallel}''$ el diferencial de área en el plano perpendicular a la dirección de confinamiento. Ya que las funciones envolventes $\psi(z)$ varían lentamente en distancias del orden de la celda unidad, es posible efectuar la simplificación

$$\psi_f^*(R_z + r_z'') \psi_f(R_z + r_z'') \approx \psi_f^*(R_z) \psi_f(R_z) \quad (4.22)$$

De esta forma se puede sacar el producto de las funciones envolventes de la integral en la celda unidad. Por otro lado, ya que las funciones $u_{n,0}$ son periódicas, repitiéndose en cada una de las celdas unidad del cristal, podemos efectuar la siguiente simplificación

$$u_{f,0}^*(\vec{R}_{\parallel} + R_z\hat{k} + \vec{r}_{\parallel}'' + r_z''\hat{k}) u_{i,0}(\vec{R}_{\parallel} + R_z\hat{k} + \vec{r}_{\parallel}'' + r_z''\hat{k}) = u_{f,0}^*(\vec{r}_{\parallel}'' + r_z''\hat{k}) u_{i,0}(\vec{r}_{\parallel}'' + r_z''\hat{k}) \quad (4.23)$$

Incluyendo en la ecuación (4.21) estas consideraciones llegamos al siguiente resultado

$$\begin{aligned}
& \int u_{f,0}^*(\vec{r}) u_{i,0}(\vec{r}) e^{-i[\vec{k}'_{\parallel} - \vec{k}_{\parallel} - \vec{q}_{\parallel}] \cdot \vec{r}_{\parallel}} e^{iq_z \cdot z} \psi_f^*(z) \psi_i(z) d\vec{r} \approx \\
& \approx \sum_{\vec{k}_{\parallel}} e^{-i[\vec{k}'_{\parallel} - \vec{k}_{\parallel} - \vec{q}_{\parallel}] \cdot \vec{r}_{\parallel}} \sum_{R_z} e^{iq_z \cdot R_z} \psi_f^*(R_z) \psi_i(R_z) \int_{c.u.} u_{f,0}^*(\vec{r}_{\parallel} + r_z \hat{k}) u_{i,0}(\vec{r}_{\parallel} + r_z \hat{k}) \times \\
& \times e^{-i[\vec{k}'_{\parallel} - \vec{k}_{\parallel} - \vec{q}_{\parallel}] \cdot \vec{r}_{\parallel}} e^{iq_z \cdot r_z} d\vec{r}_{\parallel} dr_z
\end{aligned} \quad (4.24)$$

Tanto las sumas como la integral en la celda unidad que resultan de este cálculo son independientes entre sí. Con respecto a la primera suma se tiene

$$\sum_{\vec{k}_{\parallel}} e^{-i[\vec{k}'_{\parallel} - \vec{k}_{\parallel} - \vec{q}_{\parallel}] \cdot \vec{r}_{\parallel}} = \begin{cases} N_{\parallel} & \text{si } \vec{k}'_{\parallel} - \vec{k}_{\parallel} - \vec{q}_{\parallel} = \vec{G}_{\parallel} \\ 0 & \text{si } \vec{k}'_{\parallel} - \vec{k}_{\parallel} - \vec{q}_{\parallel} \neq \vec{G}_{\parallel} \end{cases} \quad (4.25)$$

siendo \vec{G}_{\parallel} un vector de la red recíproca contenido en el mismo plano que los vectores de onda paralelos que definen los estados de los portadores. Esta relación expresa la conservación del momento en el plano perpendicular a la dirección de confinamiento. Con respecto a la segunda sumatoria podemos aproximarla por una integral

$$\sum_{R_z} e^{iq_z \cdot R_z} \psi_f^*(R_z) \psi_i(R_z) \approx \frac{1}{l_{c.u.}} \int e^{iq_z \cdot z} \psi_f^*(z) \psi_i(z) dz \quad (4.26)$$

Reuniendo todos los anteriores resultados se obtiene

$$\begin{aligned}
& \int u_{f,0}^*(\vec{r}) u_{i,0}(\vec{r}) e^{-i[\vec{k}'_{\parallel} - \vec{k}_{\parallel} - \vec{q}_{\parallel}] \cdot \vec{r}_{\parallel}} e^{iq_z \cdot z} \psi_f^*(z) \psi_i(z) d\vec{r} \approx \\
& \approx \frac{N_{\parallel}}{l_{c.u.}} \int e^{iq_z \cdot z} \psi_f^*(z) \psi_i(z) dz \int_{c.u.} u_{f,0}^*(\vec{r}_{\parallel} + r_z \hat{k}) u_{i,0}(\vec{r}_{\parallel} + r_z \hat{k}) e^{-i\vec{G}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel}} e^{iq_z \cdot r_z} d\vec{r}_{\parallel} dr_z
\end{aligned} \quad (4.27)$$

Por consiguiente, el término de matriz se escribirá como

$$\begin{aligned}
\langle c' | H' | c \rangle &= \frac{(2\pi)^{3/2}}{V} \sum_{\vec{q}} \langle c' | H'(\vec{q}) | c \rangle \int e^{iq_z \cdot z} \psi_f^*(z) \psi_i(z) dz \times \\
& \times \int_{c.u.} u_{f,0}^*(\vec{r}_{\parallel} + r_z \hat{k}) u_{i,0}(\vec{r}_{\parallel} + r_z \hat{k}) e^{-i\vec{G}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel}} e^{iq_z \cdot r_z} d\vec{r}_{\parallel} dr_z
\end{aligned} \quad (4.28)$$

Debido a que la probabilidad de *scattering* por unidad de tiempo está relacionada con el cuadrado del término de matriz, se definen por claridad

$$|I_{i,f}(q_z)|^2 = \left| \int e^{iq_z \cdot z} \psi_f^*(z) \psi_i(z) dz \right|^2 \quad (4.29)$$

y

$$G_{2D,q_z}^{i,f} = \left| \int_{c.u.} u_{f,0}^*(\vec{r}_{\parallel} + r_z \hat{k}) u_{i,0}(\vec{r}_{\parallel} + r_z \hat{k}) e^{-i\vec{G}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel}} e^{iq_z \cdot r_z} d\vec{r}_{\parallel} dr_z \right|^2 \quad (4.30)$$

Por la complejidad de la función $G_{2D,q_z}^{i,f}$, en la notación se omitirán sus variables. De esta manera, la probabilidad de *scattering* por unidad de tiempo se escribe

$$P(\vec{k}_{\parallel}, f, c; \vec{k}_{\parallel}, i, c') = \frac{(2\pi)^4}{\hbar V^2} \left| \sum_{\vec{q}} \langle c' | H'(\vec{q}) | c \rangle \right|^2 |I_{i,f}(q_z)|^2 G_{2D,q_z}^{i,f}(E' - E_m) \quad (4.31)$$

Los portadores muestran características bidimensionales debido al confinamiento al que se ven sometidos por el potencial electrostático. Los fonones ópticos y acústicos de la estructura también sufrirán de alguna forma los efectos del confinamiento, difiriendo sus relaciones $\omega(\vec{q})$ de las correspondientes tridimensionales. En un MOSFET convencional el confinamiento de los fonones es despreciable. No obstante, en los dispositivos SOI los fonones podrían presentar un comportamiento más próximo al bidimensional debido a que el semiconductor es sólo una estrecha lámina de Si entre los óxidos. En la actualidad se realizan investigaciones sobre este tema [Sotomayor-Torres, 2004], [Donetti, 2006]. Por el momento se estima que se puede realizar el estudio en una primera aproximación considerando los fonones como tridimensionales usando un potencial de deformación dependiente del espesor de la lámina de Si [Donetti, 2005].

En este trabajo se considera que los fonones de la estructura son tridimensionales. Se trata de una primera aproximación al problema, y en el futuro podría ser necesario incorporar en el estudio los efectos del confinamiento en los fonones, por lo que este trabajo queda aún abierto a futuras mejoras.

Para ello se usa el hamiltoniano de la perturbación dado por Kittel [Kittel, 1963] de la ecuación (2.12), el mismo que se usó para el *scattering* tridimensional. A partir del mismo se obtiene [Jacoboni, 1983]

$$\left| \sum_{\vec{q}} \langle c' | H'(\vec{q}) | c \rangle \right|^2 = \frac{\hbar V}{(2\pi)^3} \frac{N_q}{2\omega_q} \frac{1}{N_q + 1} |\omega_q|^2 \quad (4.32)$$

y finalmente

$$P(\vec{k}_{\parallel}, i; \vec{k}_{\parallel}, f) = \frac{\pi}{\hbar V} \frac{N_q}{2\omega_q} \frac{1}{N_q + 1} |\omega_q|^2 |I_{i,f}(q_z)|^2 G_{2D,q_z}^{i,f}(E' - E_m) \quad (4.33)$$

4.4.1 Scattering con fonones ópticos

El estudio de este tipo de *scattering* se aborda de manera semejante a la seguida en el caso tridimensional, para el que se requería una modificación de las ecuaciones sustituyendo el factor $|\mathbf{q}_\parallel|^2$ por el potencial de deformación de los fonones ópticos al cuadrado, D^2 , según el trabajo de Harrison [Harrison, 1956]:

$$P^{Opt}(\vec{k}_\parallel, i; \vec{k}'_\parallel, f) = \frac{\pi}{V} \frac{N_{op}}{N_{op} + 1} D^2 |I_{i,f}(q_z)|^2 G_{2D,q_z}^{i,f}(E' - E_{m_{op}}) \quad (4.34)$$

Para calcular la tasa de *scattering* para un portador con un cierto vector de onda paralelo \vec{k}_\parallel en una subbanda i es necesario integrar la probabilidad por unidad de tiempo de la ecuación (4.34) en todos los estados finales posibles. Cuando se lleva a cabo ese cálculo se emplea frecuentemente un sistema de coordenadas cilíndricas. En este sistema se usa el diferencial de volumen $k'_\parallel dk'_\parallel d\Omega dq_z$ para considerar todas las posibles transiciones. El factor $k'_\parallel dk'_\parallel d\Omega$ es el diferencial de área en el plano perpendicular a la dirección de confinamiento, donde se indica con la prima que la suma se efectúa en los valores finales de la transición. Por comodidad se tomará como origen de la variable Ω la dirección de \vec{k}_\parallel antes del *scattering*. El factor dq_z es el diferencial de la componente en la dirección de confinamiento del momento del fonón transferido en el *scattering*. Por tanto, sumando en todos los posibles estados finales en el plano perpendicular a la dirección de confinamiento, y sumando en todas las posibles componentes q_z de los fonones, se está teniendo en cuenta todas las posibles transiciones que pueda realizar el hueco:

$$P_{if}^{Opt}(\vec{k}_\parallel) = \frac{\pi}{(2\pi)^3} \frac{N_{op}}{N_{op} + 1} D^2 \times \int |I_{i,f}(q_z)|^2 G_{2D,q_z}^{i,f}(E' - E_{m_{op}}) k'_\parallel dk'_\parallel d\Omega dq_z \quad (4.35)$$

Efectuando la integración en las variables k'_\parallel y q_z y dejando sin integrar la variable angular Ω , se obtiene la expresión de las probabilidades angulares para ser usadas en las simulaciones, de forma equivalente a las ecuaciones (2.29), (2.30) y (2.31). En estas probabilidades resulta fundamental conocer las funciones $G_{2D,q_z}^{i,f}$. Como consecuencia del

desconocimiento que hay de las mismas, en la simulación de la dinámica de los electrones a menudo se asume tácitamente que estas funciones son la unidad por similitud con sus equivalentes tridimensionales [Fischetti, 1993]. Sin embargo, en la banda de valencia esta aproximación es demasiado burda puesto que sus equivalentes tridimensionales no son la unidad [Wiley, 1971]. Además, según las ecuaciones (2.9) y (2.10), dichas equivalentes tridimensionales dependen exclusivamente de θ , que es el ángulo entre los vectores de onda inicial y final en el *scattering*. En el caso bidimensional no es posible usar las funciones tridimensionales, ya que dicho ángulo de *scattering* no está definido como consecuencia de la indeterminación de la componente z del vector de onda de los estados.

Por este motivo, una posible alternativa que se propone en este trabajo es sustituir las funciones $G_{2D,q_z}^{i,f}$ por valores constantes que actúen, en principio, como parámetros de ajuste. Con la idea de minimizar el número de parámetros en los cálculos, en este trabajo se usa la siguiente aproximación

$$G_{2D,q_z}^{i,f} \approx \bar{G} \quad (4.36)$$

siendo \bar{G} una constante de ajuste, que se puede interpretar como un promedio angular de las funciones $G_{2D,q_z}^{i,f}$. Se usará la misma constante para todos los procesos de *scattering*, tanto intrasubbanda como intersubbanda, tanto entre subbandas de un mismo tipo de hueco como entre subbandas de distintos tipos de huecos. Dicho parámetro de ajuste ha de ser menor que uno, ya que las funciones $G_{2D,q_z}^{i,f}$ están acotadas [Costato, 1972]:

$$0 \leq G_{2D,q_z}^{i,f} \leq 1 \quad (4.37)$$

Con esta hipótesis la ecuación (4.35) es

$$P_{i \rightarrow f}^{opt}(\bar{k}_{\parallel}) = \frac{\pi \bar{G}}{(2\pi)^2 \bar{G}_{op}} \frac{N_{op}}{N_{op} + 1} D^2 \int |I_{i,f}(q_z)|^2 dq_z \int (E' - E_{m_{op}}) k'_{\parallel} dk'_{\parallel} \quad (4.38)$$

La primera integral puede calcularse de forma sencilla usando las propiedades de la transformada de Fourier [Price, 1981]

$$\int |I_{i,f}(q_z)|^2 dq_z = 2\pi \int |I_f(z)|^2 |I_i(z)|^2 dz \quad (4.39)$$

La segunda integral está relacionada con la densidad de estados del nivel de energía final.

En ella se puede hacer la transformación de la ecuación (4.4)

$$k'_{\parallel} dk'_{\parallel} = \frac{m_{H,L,S,so}}{\hbar^2} \sqrt{\epsilon_{H,L,S}(E'-V_f)} \epsilon_{H,L,S}(E'-V_f) dE' \quad (4.40)$$

donde E' es la energía total del portador tras la transición, y se ha usado el valor efectivo del potencial electrostático en la subbanda final V_f , ecuación (4.7), con el fin de que se pueda usar este cambio de variable para cualquier perfil de potencial electrostático. Integrando en los estados finales posibles, se obtiene

$$\int (E'-E \mp \epsilon_{op}) k'_{\parallel} dk'_{\parallel} = \frac{m_{H,L,S,so}}{\hbar^2} \sqrt{\epsilon_{H,L,S}(E \pm \epsilon_{op} - V_f)} \epsilon_{H,L,S}(E \pm \epsilon_{op} - V_f) \quad (4.41)$$

Y finalmente obtenemos las siguientes tasas de *scattering* con fonones ópticos

$$P_{H,n;L,n;S,n}^{Opt} (E) = \frac{m_H D^2}{2 \hbar \epsilon_{op}} \frac{N_{op}}{N_{op} + 1} \int |H,n'(z)|^2 |H,n;L,n;S,n(z)|^2 dz \times \sqrt{\epsilon_H(E \pm \epsilon_{op} - V_{H,n'})} \epsilon_H(E \pm \epsilon_{op} - V_{H,n'}) \quad (4.42)$$

$$P_{H,n;L,n;S,n}^{Opt} (E) = \frac{m_L D^2}{2 \hbar \epsilon_{op}} \frac{N_{op}}{N_{op} + 1} \int |L,n'(z)|^2 |H,n;L,n;S,n(z)|^2 dz \times \sqrt{\epsilon_L(E \pm \epsilon_{op} - V_{L,n'})} \epsilon_L(E \pm \epsilon_{op} - V_{L,n'}) \quad (4.43)$$

$$P_{H,n;L,n;S,n}^{Opt} (E) = \frac{m_S D^2}{2 \hbar \epsilon_{op}} \frac{N_{op}}{N_{op} + 1} \int |S,n'(z)|^2 |H,n;L,n;S,n(z)|^2 dz \times \sqrt{\epsilon_S(E \pm \epsilon_{op} - V_{S,n'})} \epsilon_S(E \pm \epsilon_{op} - V_{S,n'}) \quad (4.44)$$

La parte superior (inferior) de cada una de estas ecuaciones es la probabilidad de absorción (emisión) de un fonón óptico por el portador. Por claridad, en esta etapa del cálculo se han sustituido los subíndices i y f , que expresaban en general el estado inicial y final en la transición, por subíndices compuestos por un primer subíndice, que indica el tipo de hueco (H , L o S), y un segundo que designa el número de la subbanda dentro del conjunto correspondiente, siendo n para el estado inicial y n' para el final. Por ejemplo, $P_{L,n;H,n'}^{Opt} (E)$ es la tasa de *scattering* para transiciones cuyo estado inicial es la n -ésima subbanda de huecos ligeros y cuyo estado final es la n' -ésima subbanda de huecos pesados.

Acerca de las anteriores tasas de *scattering*, comentamos al comienzo de esta sección la posibilidad de que el valor del potencial de deformación de los fonones ópticos confinados en una estrecha capa de Si difiriese de su valor tridimensional. Por tanto, D podría usarse como un parámetro de ajuste en el simulador. Sin embargo, también nos resulta

desconocido el valor medio de ϵ . Combinando ambos parámetros desconocidos podemos definir un parámetro de ajuste ϵ que los englobe

$$\epsilon^2 = \epsilon_0 D^2 \quad (4.45)$$

El mismo concepto fue el que se empleó en la formulación de las tasas de *scattering* tridimensionales, ecuaciones (2.35), (2.36) y (2.37), donde se usaba un potencial de deformación que incluía el promedio angular de la función $G(\mathbf{r})$.

Usando esta definición, la expresión final de las probabilidades de *scattering* es

$$P_{H,n;L,n;S,n}^{Opt} (E) = \frac{m_H^2}{2\pi \hbar} \frac{N_{op}}{N_{op} + 1} \int_{H,n'} |G_{H,n;L,n;S,n}(z)|^2 dz \times \sqrt{\epsilon_H(E \pm \epsilon_{op} - V_{H,n'})} \epsilon_H(E \pm \epsilon_{op} - V_{H,n'}) \quad (4.46)$$

$$P_{H,n;L,n;S,n}^{Opt} (E) = \frac{m_L^2}{2\pi \hbar} \frac{N_{op}}{N_{op} + 1} \int_{L,n'} |G_{H,n;L,n;S,n}(z)|^2 dz \times \sqrt{\epsilon_L(E \pm \epsilon_{op} - V_{L,n'})} \epsilon_L(E \pm \epsilon_{op} - V_{L,n'}) \quad (4.47)$$

$$P_{H,n;L,n;S,n}^{Opt} (E) = \frac{m_S^2}{2\pi \hbar} \frac{N_{op}}{N_{op} + 1} \int_{S,n'} |G_{H,n;L,n;S,n}(z)|^2 dz \times \sqrt{\epsilon_S(E \pm \epsilon_{op} - V_{S,n'})} \epsilon_S(E \pm \epsilon_{op} - V_{S,n'}) \quad (4.48)$$

4.4.2 Scattering con fonones acústicos

La ecuación (4.33) es el punto de partida del cálculo de las tasas de *scattering* con fonones acústicos. Esta expresión se simplifica de la misma forma que en el caso tridimensional usando un tensor de deformación isótropo, y por consiguiente $|\epsilon_{ij} q_j|^2 \approx \epsilon_0^2 q^2$. Con respecto a la constante de acoplamiento ϵ_0 se puede hacer la misma observación que se hizo para la correspondiente a los fonones ópticos: en una estrecha lámina de Si su valor podría diferir notablemente del que presenta en un cristal tridimensional. Por otro lado, las funciones $G_{2D,q_z}^{i,f}$ siguen siendo desconocidas, y se acepta que es válida la aproximación ya indicada en la ecuación (4.36). Con estas consideraciones se tiene que la tasa de *scattering* con un fonón acústico es

$$P(\vec{k}_{\parallel}, i; \vec{k}_{\parallel}, f) = \frac{\pi \omega_q^2 \omega_0^2}{\omega_q} \frac{N_q}{N_q + 1} |I_{i,f}(q_z)|^2 (E' - E_m) \quad (4.49)$$

En esta sección se pretende formular unas tasas de *scattering* con fonones acústicos siguiendo un camino paralelo al que se siguió en el caso tridimensional. Recordemos que en el apartado 2.2.2 se usó un modelo de *scattering* inelástico donde se calculaba una energía media para el fonón acústico que era función del tipo de transición y de la temperatura del sistema. Con la misma intención se buscará a continuación el valor de la energía media de los fonones acústicos que interaccionan con los portadores en cada una de las posibles transiciones del *scattering* bidimensional. Tras este paso, el cálculo de las tasas de *scattering* será equivalente al que se ha seguido en la sección anterior para los fonones ópticos.

Energía media de los fonones acústicos

A partir del modelo de la relación $\omega(\vec{q})$ de los fonones acústicos que se usa en este trabajo, ecuación (2.11), se puede admitir de partida que la energía media de los fonones acústicos que interaccionarán con los portadores en una transición entre una subbanda inicial i y una subbanda final f , $\omega_{acu,i \rightarrow f}^{2D}$, verifica la siguiente relación

$$\omega_{acu,i \rightarrow f}^{2D} = \hbar \omega \sqrt{\langle q^2 \rangle_{2D,i \rightarrow f}} \quad (4.50)$$

donde $\langle q^2 \rangle_{2D,i \rightarrow f}$ es el valor medio del cuadrado del momento transferido por los fonones acústicos al portador en la citada transición. Dicho valor puede calcularse como

$$\langle q^2 \rangle_{2D,i \rightarrow f} = \langle q_{\parallel}^2 \rangle_{2D,i \rightarrow f} + \langle q_z^2 \rangle_{2D,i \rightarrow f} \quad (4.51)$$

siendo, así mismo, $\langle q_{\parallel}^2 \rangle_{2D,i \rightarrow f}$ y $\langle q_z^2 \rangle_{2D,i \rightarrow f}$ los valores medios de los cuadrados de las componentes del momento transferidas al portador en el plano perpendicular a la dirección de confinamiento y en la dirección de confinamiento, respectivamente.

Para calcular $\langle q_{\parallel}^2 \rangle_{2D,i \rightarrow f}$ se parte de la conservación del momento en el plano perpendicular a la dirección de confinamiento

$$q_{\parallel}^2 = k_{\parallel}'^2 + k_{\parallel}^2 - 2k_{\parallel}' k_{\parallel} \cos \square \quad (4.52)$$

Conocidas las relaciones entre la energía y el momento de las subbandas inicial y final de la transición, que se denominan $E_i(k_{\parallel})$ y $E_f(k_{\parallel}')$ respectivamente, se puede conocer la energía total del portador antes y después del *scattering*. Sin embargo, para simplificar el cálculo se usa de nuevo la misma aproximación que se realizó para determinar la energía media de los fonones acústicos en el *scattering* tridimensional, esto es, en primera aproximación se supone que la energía del fonón acústico es pequeña comparada con la energía del hueco, y por consiguiente $E_i(k_{\parallel}) \approx E_f(k_{\parallel}')$. Esta aproximación hace posible que se pueda relacionar k_{\parallel}' con k_{\parallel} de la siguiente manera

$$k_{\parallel}' = \sqrt{\square_{i,f}(E)} k_{\parallel} \quad (4.53)$$

Las funciones $\square_{i,f}(E)$ dependen exclusivamente de la energía total del portador, y se pueden obtener a partir de las relaciones entre la energía y el momento de las subbandas inicial y final. Es necesario tener en cuenta que dicha relación sólo tiene sentido para energías mayores que E_{\min} , el máximo de los fondos de las subbandas inicial y final, donde ambos estados son mutuamente accesibles a través de un *scattering* elástico. Esta definición permite expresar la conservación del momento como

$$q_{\parallel}^2 = k_{\parallel}^2 \left\{ 1 + \square_{i,f}(E) - 2\sqrt{\square_{i,f}(E)} \cos \square \right\} \quad (4.54)$$

y el promedio angular de esta magnitud en el plano es

$$\overline{q_{\parallel}^2}_{i \rightarrow f}(E) = k_{\parallel}^2 \{ 1 + \square_{i,f}(E) \} \quad (4.55)$$

Este promedio depende de la energía total del portador. Por tanto, habrá que tener en cuenta la función de distribución en energías de los portadores en la subbanda inicial para estimar el valor de $\langle q_{\parallel}^2 \rangle_{2D, i \rightarrow f}$, que será independiente de la energía, equivalentemente a como se hizo en la ecuación (2.45).

$$\langle q_{\parallel}^2 \rangle_{2D, i \rightarrow f} = \frac{\int_{E_{\min}}^{\infty} \overline{q_{\parallel}^2}_{i \rightarrow f}(E) D_{2D,i}(E) e^{-E/k_B T} dE}{\int_{E_{\min}}^{\infty} D_{2D,i}(E) e^{-E/k_B T} dE} \quad (4.56)$$

Al igual que allí, se admite como válida la estadística de Boltzmann en este cálculo. Además, en este caso se ha usado la densidad de estados bidimensional de la subbanda

inicial i , $D_{2D,i}(E)$, que se mostró en la ecuación (4.8). Considerando también las relaciones indicadas en las ecuaciones (4.53) y (3.31), se deducen los siguientes resultados para una subbanda isótropa y no parabólica:

$$\begin{aligned} \langle q_{\parallel}^2 \rangle_{2D,i f}^{H,n;L,n \parallel H,n';L,n'} &= \\ &= \frac{2}{\hbar^2} \frac{\int_{E_{\min}}^{\infty} \left[\frac{m_i \mu_{\parallel,i}}{\mu_i(\mu_{\parallel,i})} + \frac{m_f \mu_{\parallel,f}}{\mu_f(\mu_{\parallel,f})} \right] \sqrt{\mu_i(E-V_i)} \mu_i(E-V_i) e^{-E/k_B T} dE}{\int_{E_{\min}}^{\infty} \sqrt{\mu_i(E-V_i)} \mu_i(E-V_i) e^{-E/k_B T} dE} \end{aligned} \quad (4.57)$$

$$\begin{aligned} \langle q_{\parallel}^2 \rangle_{2D,i f}^{H,n;L,n \parallel S,n'} &= \\ &= \frac{2}{\hbar^2} \frac{\int_{E_{\min}}^{\infty} \left[\frac{m_i \mu_{\parallel,i}}{\mu_i(\mu_{\parallel,i})} + \frac{m_{so} \mu_{\parallel,S,n'} - \mu_{so}}{\mu_S(\mu_{\parallel,S,n'})} \right] \sqrt{\mu_i(E-V_i)} \mu_i(E-V_i) e^{-E/k_B T} dE}{\int_{E_{\min}}^{\infty} \sqrt{\mu_i(E-V_i)} \mu_i(E-V_i) e^{-E/k_B T} dE} \end{aligned} \quad (4.58)$$

$$\begin{aligned} \langle q_{\parallel}^2 \rangle_{2D,i f}^{S,n \parallel H,n';L,n'} &= \\ &= \frac{2}{\hbar^2} \frac{\int_{E_{\min}}^{\infty} \left[\frac{m_{so} \mu_{\parallel,S,n} - \mu_{so}}{\mu_S(\mu_{\parallel,S,n})} + \frac{m_f \mu_{\parallel,f}}{\mu_f(\mu_{\parallel,f})} \right] \sqrt{\mu_S(E-V_{S,n})} \mu_S(E-V_{S,n}) e^{-E/k_B T} dE}{\int_{E_{\min}}^{\infty} \sqrt{\mu_S(E-V_{S,n})} \mu_S(E-V_{S,n}) e^{-E/k_B T} dE} \end{aligned} \quad (4.59)$$

$$\begin{aligned} \langle q_{\parallel}^2 \rangle_{2D,i f}^{S,n \parallel S,n'} &= \\ &= \frac{2m_{so}}{\hbar^2} \frac{\int_{E_{\min}}^{\infty} \left[\frac{\mu_{\parallel,S,n} - \mu_{so}}{\mu_S(\mu_{\parallel,S,n})} + \frac{\mu_{\parallel,S,n'} - \mu_{so}}{\mu_S(\mu_{\parallel,S,n'})} \right] \sqrt{\mu_S(E-V_{S,n})} \mu_S(E-V_{S,n}) e^{-E/k_B T} dE}{\int_{E_{\min}}^{\infty} \sqrt{\mu_S(E-V_{S,n})} \mu_S(E-V_{S,n}) e^{-E/k_B T} dE} \end{aligned} \quad (4.60)$$

La ecuación (4.57) se aplica en todas las transiciones cuyos estados inicial y final sean de huecos pesados o ligeros. La ecuación (4.58) se refiere a transiciones desde subbandas de huecos pesados o ligeros a subbandas de huecos *split-off*, mientras que la ecuación (4.59) se refiere a las transiciones inversas, las que se inician en subbandas de huecos *split-off* y terminan en subbandas de huecos pesados o ligeros. Por último, la ecuación (4.60) se usa en las transiciones cuyos estados inicial y final se encuentren en subbandas de huecos *split-off*. La notación seguida señala todas estas consideraciones en el superíndice de la función

$$\langle q_{\parallel}^2 \rangle_{2D,i f}.$$

Para realizar un estudio que considere la anisotropía de la banda de valencia, tal y como se mostró en la sección 3.7, debería usarse en la deducción de las ecuaciones anteriores i) la densidad de estados bidimensional que se deduce del modelo anisótropo y ii) la relación entre el módulo del vector de onda paralelo y la energía paralela expresada en la ecuación (3.42). Con respecto al primer punto, en el apartado 4.2 se comentó que las densidades de estados del modelo anisótropo se obtienen a partir de la ecuación (4.8) sustituyendo las masas efectivas de allí por los valores m_{\parallel} definidos en la ecuación (3.41). No obstante, este cambio no altera las expresiones para calcular las funciones $\langle q_{\parallel}^2 \rangle_{2D, \parallel f}$ del modelo anisótropo ya que, al realizar el cociente entre las integrales, se cancelan las constantes. Sin embargo, el segundo punto sí modifica el cálculo, obteniéndose las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned} \langle q_{\parallel}^2 \rangle_{2D, \parallel f}^{H,n;L,n \parallel H,n';L,n'} &= \\ &= \frac{2}{\hbar^2} \frac{\int_{E_{\min}}^{\infty} \frac{m_{\parallel,i} \rho_{\parallel,i}}{\rho_i(\rho_{\parallel,i})} + \frac{m_{\parallel,f} \rho_{\parallel,f}}{\rho_f(\rho_{\parallel,f})} \sqrt{\rho_i(E - V_i)} \rho_i(E - V_i) e^{-E/k_B T} dE}{\int_{E_{\min}}^{\infty} \sqrt{\rho_i(E - V_i)} \rho_i(E - V_i) e^{-E/k_B T} dE} \end{aligned} \quad (4.61)$$

$$\begin{aligned} \langle q_{\parallel}^2 \rangle_{2D, \parallel f}^{H,n;L,n \parallel S,n'} &= \\ &= \frac{2}{\hbar^2} \frac{\int_{E_{\min}}^{\infty} \frac{m_{\parallel,i} \rho_{\parallel,i}}{\rho_i(\rho_{\parallel,i})} + \frac{m_{so} \rho_{\parallel,S,n'} - \rho_{so}}{\rho_S(\rho_{\parallel,S,n'})} \sqrt{\rho_i(E - V_i)} \rho_i(E - V_i) e^{-E/k_B T} dE}{\int_{E_{\min}}^{\infty} \sqrt{\rho_i(E - V_i)} \rho_i(E - V_i) e^{-E/k_B T} dE} \end{aligned} \quad (4.62)$$

$$\begin{aligned} \langle q_{\parallel}^2 \rangle_{2D, \parallel f}^{S,n \parallel H,n';L,n'} &= \\ &= \frac{2}{\hbar^2} \frac{\int_{E_{\min}}^{\infty} \frac{m_{so} \rho_{\parallel,S,n} - \rho_{so}}{\rho_S(\rho_{\parallel,S,n})} + \frac{m_{\parallel,f} \rho_{\parallel,f}}{\rho_f(\rho_{\parallel,f})} \sqrt{\rho_S(E - V_{S,n})} \rho_S(E - V_{S,n}) e^{-E/k_B T} dE}{\int_{E_{\min}}^{\infty} \sqrt{\rho_S(E - V_{S,n})} \rho_S(E - V_{S,n}) e^{-E/k_B T} dE} \end{aligned} \quad (4.63)$$

La ecuación (4.60) se mantiene aunque se realice un estudio usando el modelo anisótropo de banda descrito en este trabajo, ya que el modelo considera isotrópica la banda de *split-off*.

La energía paralela ρ_{\parallel} es una función de la energía total del portador, E , cuando se considera la no parabolicidad. De la ecuación (3.10) puede obtenerse dicha relación

$$\rho_{\parallel} = E - E_z(E) \quad (4.64)$$

El hecho que complica notablemente el cálculo de las integrales es que los autovalores E_z de la ecuación de Schrödinger son a su vez funciones de la energía total del portador. No obstante, ya que la variación de E_z suele ser pequeña, podemos despreciar esta dependencia para efectuar este promedio y suponer que $E \approx \epsilon_{\parallel} + E_{z,i}(0)$, siendo E la energía total del portador y $E_{z,i}(0)$ el valor de E_z en el fondo de la subbanda i , que es un valor constante. Así, las ecuaciones (4.57), (4.58), (4.59) y (4.60) se transforman en:

$$\begin{aligned} \langle q_{\parallel}^2 \rangle_{2D; i \bar{0} f}^{H,n;L,n \bar{0} H,n';L,n'} &= \frac{2}{\hbar^2} \frac{1}{\int_{E_{\min}}^{\infty} \sqrt{\epsilon_i(E - V_i)} \epsilon_i(E - V_i) e^{-E/k_B T} dE} \times \\ &\times \int_{E_{\min}}^{\infty} \frac{\epsilon_i m_i [E - E_{z,i}(0)]}{\epsilon_i (E - E_{z,i}(0))} + \frac{m_f [E - E_{z,f}(0)]}{\epsilon_f (E - E_{z,f}(0))} \sqrt{\epsilon_i(E - V_i)} \epsilon_i(E - V_i) e^{-E/k_B T} dE \end{aligned} \quad (4.65)$$

$$\begin{aligned} \langle q_{\parallel}^2 \rangle_{2D; i \bar{0} f}^{H,n;L,n \bar{0} S,n'} &= \frac{2}{\hbar^2} \frac{1}{\int_{E_{\min}}^{\infty} \sqrt{\epsilon_i(E - V_i)} \epsilon_i(E - V_i) e^{-E/k_B T} dE} \times \\ &\times \int_{E_{\min}}^{\infty} \frac{\epsilon_i m_i [E - E_{z,i}(0)]}{\epsilon_i (E - E_{z,i}(0))} + \frac{m_{so} [E - E_{z;S,n'}(0) - \epsilon_{so}]}{\epsilon_S (E - E_{z;S,n'}(0))} \sqrt{\epsilon_i(E - V_i)} \epsilon_i(E - V_i) e^{-E/k_B T} dE \end{aligned} \quad (4.66)$$

$$\begin{aligned} \langle q_{\parallel}^2 \rangle_{2D; i \bar{0} f}^{S,n \bar{0} H,n';L,n'} &= \frac{2}{\hbar^2} \frac{1}{\int_{E_{\min}}^{\infty} \sqrt{\epsilon_S(E - V_{S,n})} \epsilon_S(E - V_{S,n}) e^{-E/k_B T} dE} \times \\ &\times \int_{E_{\min}}^{\infty} \frac{\epsilon_S m_{so} [E - E_{z;S,n}(0) - \epsilon_{so}]}{\epsilon_S (E - E_{z;S,n}(0))} + \frac{m_f [E - E_{z,f}(0)]}{\epsilon_f (E - E_{z,f}(0))} \sqrt{\epsilon_S(E - V_{S,n})} \epsilon_S(E - V_{S,n}) e^{-E/k_B T} dE \end{aligned} \quad (4.67)$$

$$\begin{aligned} \langle q_{\parallel}^2 \rangle_{2D; S,n \bar{0} S,n'} &= \frac{2m_{so}}{\hbar^2} \frac{1}{\int_{E_{\min}}^{\infty} \sqrt{\epsilon_S(E - V_{S,n})} \epsilon_S(E - V_{S,n}) e^{-E/k_B T} dE} \times \\ &\times \int_{E_{\min}}^{\infty} \frac{\epsilon_S [E - E_{z;S,n}(0) - \epsilon_{so}]}{\epsilon_S (E - E_{z;S,n}(0))} + \frac{\epsilon_S [E - E_{z;S,n'}(0) - \epsilon_{so}]}{\epsilon_S (E - E_{z;S,n'}(0))} \sqrt{\epsilon_S(E - V_{S,n})} \epsilon_S(E - V_{S,n}) e^{-E/k_B T} dE \end{aligned} \quad (4.68)$$

y las ecuaciones (4.61), (4.62) y (4.63) se transforman en:

$$\langle q_{\parallel}^2 \rangle_{2D, i \rightarrow f}^{H, n; L, n \rightarrow H, n'; L, n'} = \frac{2}{\hbar^2} \frac{1}{\int_{E_{\min}}^{\infty} \sqrt{\rho_i(E - V_i)} \rho_i(E - V_i) e^{-E/k_B T} dE} \times \quad (4.69)$$

$$\times \int_{E_{\min}}^{\infty} \left[\frac{m_{\parallel, i} [E - E_{z, i}(0)]}{\rho_i(E - E_{z, i}(0))} + \frac{m_{\parallel, f} [E - E_{z, f}(0)]}{\rho_f(E - E_{z, f}(0))} \right] \sqrt{\rho_i(E - V_i)} \rho_i(E - V_i) e^{-E/k_B T} dE$$

$$\langle q_{\parallel}^2 \rangle_{2D, i \rightarrow f}^{H, n; L, n \rightarrow S, n'} = \frac{2}{\hbar^2} \frac{1}{\int_{E_{\min}}^{\infty} \sqrt{\rho_i(E - V_i)} \rho_i(E - V_i) e^{-E/k_B T} dE} \times \quad (4.70)$$

$$\times \int_{E_{\min}}^{\infty} \left[\frac{m_{\parallel, i} [E - E_{z, i}(0)]}{\rho_i(E - E_{z, i}(0))} + \frac{m_{so} [E - E_{z; S, n'}(0) - E_{so}]}{\rho_S(E - E_{z; S, n'}(0))} \right] \sqrt{\rho_i(E - V_i)} \rho_i(E - V_i) e^{-E/k_B T} dE$$

$$\langle q_{\parallel}^2 \rangle_{2D, i \rightarrow f}^{S, n \rightarrow H, n'; L, n'} = \frac{2}{\hbar^2} \frac{1}{\int_{E_{\min}}^{\infty} \sqrt{\rho_S(E - V_{S, n})} \rho_S(E - V_{S, n}) e^{-E/k_B T} dE} \times \quad (4.71)$$

$$\times \int_{E_{\min}}^{\infty} \left[\frac{m_{so} [E - E_{z; S, n} - E_{so}]}{\rho_S(E - E_{z; S, n})} + \frac{m_{\parallel, f} [E - E_{z; f}]}{\rho_f(E - E_{z; f})} \right] \sqrt{\rho_S(E - V_{S, n})} \rho_S(E - V_{S, n}) e^{-E/k_B T} dE$$

Una vez estimado el valor de $\langle q_{\parallel}^2 \rangle_{2D, i \rightarrow f}$, el siguiente paso será determinar $\langle q_z^2 \rangle_{2D, i \rightarrow f}$.

Este cálculo ha de tener en cuenta que la componente q_z de los fonones que interaccionan con los portadores no está perfectamente definida en una transición aunque se conozcan los estados inicial y final del portador. La causa de este comportamiento es que no existe una ley similar a la de conservación del momento en el plano perpendicular a la dirección de confinamiento, y por tanto hay muchos valores posibles de q_z que pueden efectuar la transición. Sin embargo, no todos son igualmente probables. La probabilidad de que un fonón con componente q_z entre en juego en una transición entre dos subbandas de funciones envolventes en la dirección de confinamiento ρ_i y ρ_f es proporcional, según la ecuación (4.49), a

$$p_{i \rightarrow f}(q_z) \propto \frac{q_z^2}{\rho_q} \left[\frac{N_q}{N_q + 1} \left| \int \rho_f^*(z) \rho_i(z) e^{iq_z z} dz \right|^2 \right] \quad (4.72)$$

Para simplificar esta expresión se puede admitir que $N_q + 1 \approx N_q$, que será admisible dado que la energía de los fonones acústicos es pequeña. De esta manera se obtiene una

probabilidad independiente de si el proceso es de emisión o de absorción. Además, teniendo en cuenta la relación lineal entre la energía y el momento de los fonones acústicos que se ha usado en este trabajo, ecuación (2.11), la frecuencia ω_q es proporcional al módulo del momento del vector de onda del fonón. Descomponiendo éste en sus componentes en la dirección de confinamiento y perpendicular a la misma, la ecuación (4.72) se transforma en

$$p_{i \rightarrow f}(q_z) = \frac{1}{\sqrt{q_{\parallel}^2 + q_z^2}} \times \frac{1}{\Omega} e^{-\frac{\hbar v \sqrt{q_{\parallel}^2 + q_z^2}}{k_B T}} - \frac{1}{\Omega} \times \left| \int_{\Omega} \psi_f^*(z) \psi_i(z) e^{iq_z z} dz \right|^2 \quad (4.73)$$

Esta probabilidad depende del valor que tome q_{\parallel}^2 . En una primera aproximación se propone sustituir éste por su valor medio calculado anteriormente.

En el caso de que se eliminase el confinamiento y las funciones ψ_i y ψ_f fuesen ondas planas con un momento definido en la dirección de confinamiento, la integral se transformaría en una delta de Dirac que expresaría la ley de conservación del momento en dicha dirección. Cuando hay confinamiento, esta ley no existe, y la anterior expresión considera la probabilidad de cada uno de los valores q_z .

Un hecho que puede pasar inadvertido, pero que es de gran importancia en la determinación de la energía media de los fonones acústicos, es la simetría par de la función de probabilidad $p_{i \rightarrow f}(q_z)$. El argumento de esta función es la componente del fonón acústico en la dirección de confinamiento, y puede tomar tanto valores positivos como negativos. Como se puede comprobar, $p_{i \rightarrow f}(-q_z) = p_{i \rightarrow f}(q_z)$, y por lo tanto, si se calcula $\langle q_z \rangle_{2D, i \rightarrow f}$, obtendríamos siempre un resultado nulo. De esta forma, y para evitar trabajar con la función valor absoluto, se ha preferido un cálculo de la energía media de los fonones acústicos tal y como se expresó en la ecuación (4.50).

Usando la anterior función de probabilidad se puede estimar el valor medio de q_z^2 en una transición entre dos subbandas

$$\langle q_z^2 \rangle_{2D, i \rightarrow f} = \frac{\int q_z^2 p_{i \rightarrow f}(q_z) dq_z}{\int p_{i \rightarrow f}(q_z) dq_z} \quad (4.74)$$

El denominador de la ecuación anterior es el factor que normaliza la función de probabilidad. Para implementar numéricamente el cálculo del promedio anterior se propone usar la siguiente igualdad:

$$\left| \int_{f_i}^* (z) \int_i (z) e^{iq_z z} dz \right|^2 = \left[\int_{f_i}^* (z) \int_i (z) \cos(q_z z) dz \right]^2 + \left[\int_{f_i}^* (z) \int_i (z) \sin(q_z z) dz \right]^2 \quad (4.75)$$

que simplifica la tarea de efectuar el promedio, puesto que se evita trabajar con números complejos.

Una cuestión importante que hay que destacar de la ecuación (4.74) es que el promedio $\langle q_z^2 \rangle_{2D, i \rightarrow f}$ depende únicamente de las subbandas inicial y final, y es por tanto independiente de la energía del portador. Además, la consideración de isotropía o anisotropía en el modelo de la banda de valencia está implícita en las funciones envolventes, por lo que la anterior ecuación es válida para ambos modelos.

Combinando las ecuaciones (4.50) y (4.51) con las que se han demostrado en esta sección para obtener los valores de $\langle q_{\parallel}^2 \rangle_{2D, i \rightarrow f}$ y $\langle q_z^2 \rangle_{2D, i \rightarrow f}$ se puede calcular el valor medio de la energía que se pone en juego en un *scattering* con fonones acústicos.

Tasas de scattering

Así pues, una vez que se ha determinado los distintos valores de las energías medias de los fonones acústicos para cada transición, se incorpora la aproximación de fonones acústicos de energía constante a la ecuación (4.49) efectuando las siguientes sustituciones:

$$q^2 \approx \langle q^2 \rangle_{2D, i \rightarrow f} = \frac{N_{acu, i \rightarrow f}^{2D}}{\hbar u} \quad (4.76)$$

$$\omega_q \approx \frac{N_{acu, i \rightarrow f}^{2D}}{h}$$

La probabilidad por unidad de tiempo de experimentar un *scattering* se escribe tras la aproximación como

$$P^{Acu}(\vec{k}_{\parallel}, i; \vec{k}_{\parallel}, f) = \frac{\pi N_{acu, i \rightarrow f}^{2D}}{\hbar u^2 V} \frac{N_{\langle q^2 \rangle_{2D, i \rightarrow f}}}{N_{\langle q^2 \rangle_{2D, i \rightarrow f}} + 1} |I_{i, f}(q_z)|^2 (E' - E_m)_{acu, i \rightarrow f}^{2D} \quad (4.77)$$

Se obtienen las tasas de *scattering* integrando en los estados finales posibles.

$$P_{i\parallel f}^{Acu}(\vec{k}_{\parallel}) = \frac{\pi \epsilon_0^{2D} \epsilon_f^2}{(2\pi)^3 \hbar u^2} \frac{N_{\langle q^2 \rangle_{2D, i\parallel f}}}{N_{\langle q^2 \rangle_{2D, i\parallel f}} + 1} \times \int |I_{i,f}(q_z)|^2 dq_z \int (E' - E \pm \epsilon_{acu, i\parallel f}^{2D}) k'_{\parallel} dk'_{\parallel} d\Omega \quad (4.78)$$

La resolución de las integrales anteriores es idéntica a la que se llevó a cabo para el cálculo de las tasas de *scattering* con fonones ópticos, ecuaciones (4.39) y (4.41). Por consiguiente, las tasas de *scattering* con fonones acústicos serán

$$P_{H,n;L,n;S,n\parallel H,n'}^{Acu}(E) = \frac{m_H \epsilon_0^{2D} \epsilon_f^2}{2\hbar^3 u^2} \frac{N_{\langle q^2 \rangle_{2D, i\parallel f}}}{N_{\langle q^2 \rangle_{2D, i\parallel f}} + 1} \times \left[\int |H,n'(z)|^2 |H,n;L,n;S,n(z)|^2 dz \right] \sqrt{\epsilon_H(E \pm \epsilon_{acu, i\parallel f}^{2D} - V_{H,n'})} \epsilon_H(E \pm \epsilon_{acu, i\parallel f}^{2D} - V_{H,n'}) \quad (4.79)$$

$$P_{H,n;L,n;S,n\parallel L,n'}^{Acu}(E) = \frac{m_L \epsilon_0^{2D} \epsilon_f^2}{2\hbar^3 u^2} \frac{N_{\langle q^2 \rangle_{2D, i\parallel f}}}{N_{\langle q^2 \rangle_{2D, i\parallel f}} + 1} \times \left[\int |L,n'(z)|^2 |H,n;L,n;S,n(z)|^2 dz \right] \sqrt{\epsilon_L(E \pm \epsilon_{acu, i\parallel f}^{2D} - V_{L,n'})} \epsilon_L(E \pm \epsilon_{acu, i\parallel f}^{2D} - V_{L,n'}) \quad (4.80)$$

$$P_{H,n;L,n;S,n\parallel S,n'}^{Acu}(E) = \frac{m_{so} \epsilon_0^{2D} \epsilon_f^2}{2\hbar^3 u^2} \frac{N_{\langle q^2 \rangle_{2D, i\parallel f}}}{N_{\langle q^2 \rangle_{2D, i\parallel f}} + 1} \times \left[\int |S,n'(z)|^2 |H,n;L,n;S,n(z)|^2 dz \right] \sqrt{\epsilon_S(E \pm \epsilon_{acu, i\parallel f}^{2D} - V_{S,n'})} \epsilon_S(E \pm \epsilon_{acu, i\parallel f}^{2D} - V_{S,n'}) \quad (4.81)$$

Cuando se estudiaron las tasas de *scattering* con fonones ópticos se comentó que tanto ϵ_0 como la constante de acoplamiento de los fonones ópticos podrían considerarse como parámetros de ajuste. De la misma manera, tanto ϵ_0 como ϵ_f pueden ser tratadas como parámetros de ajuste para los fonones acústicos, y por ello resulta útil combinarlas en un único parámetro. Definiendo

$$\epsilon_0^2 \epsilon_f^2 = \epsilon_0^2 \quad (4.82)$$

las tasas de *scattering* anteriores se escribirán

$$P_{H,n;L,n;S,n\parallel H,n'}^{Acu}(E) = \frac{m_H \epsilon_0^{2D} \epsilon_f^2}{2\hbar^3 u^2} \frac{N_{\langle q^2 \rangle_{2D, i\parallel f}}}{N_{\langle q^2 \rangle_{2D, i\parallel f}} + 1} \int |H,n'(z)|^2 |H,n;L,n;S,n(z)|^2 dz \times \sqrt{\epsilon_H(E \pm \epsilon_{acu, i\parallel f}^{2D} - V_{H,n'})} \epsilon_H(E \pm \epsilon_{acu, i\parallel f}^{2D} - V_{H,n'}) \quad (4.83)$$

$$P_{H,n;L,n;S,m}^{Acu}{}_{L,n'}(E) = \frac{m_L \int_{acu,i}^{2D} \int_f^2 N_{\langle q^2 \rangle_{2D,i}}}{2\hbar^3 u^2} + 1 \int_{L,n'}(z) \left| \int_{H,n;L,n;S,n}(z) \right|^2 dz \times$$

$$\times \sqrt{\int_L(E \pm \int_{acu,i}^{2D} \int_f -V_{L,n'}) \int_L(E \pm \int_{acu,i}^{2D} \int_f -V_{L,n'})}$$
(4.84)

$$P_{H,n;L,n;S,m}^{Acu}{}_{S,n'}(E) = \frac{m_{so} \int_{acu,i}^{2D} \int_f^2 N_{\langle q^2 \rangle_{2D,i}}}{2\hbar^3 u^2} + 1 \int_{S,n'}(z) \left| \int_{H,n;L,n;S,n}(z) \right|^2 dz \times$$

$$\times \sqrt{\int_S(E \pm \int_{acu,i}^{2D} \int_f -V_{S,n'}) \int_S(E \pm \int_{acu,i}^{2D} \int_f -V_{S,n'})}$$
(4.85)

4.4.3 Tasas de scattering bidimensionales. Scattering debido a la rugosidad superficial.

En el estudio del comportamiento de los portadores en gases confinados en una dirección por un potencial electrostático el hamiltoniano que se propone considera dicho potencial superpuesto a otro que es perfectamente periódico en todo el plano perpendicular a dicha dirección de confinamiento. De hecho, las funciones de onda que se proponen para el portador, ecuación (4.19), mantienen la periodicidad característica de las funciones de Bloch en ese plano. No obstante, cuando la *interface* o *interfaces* presentes en la estructura no son perfectamente planas, el potencial en cada plano paralelo a las mismas pierde su periodicidad, y por consiguiente ni el hamiltoniano resuelto ni las funciones de onda propuestas serán las adecuadas. De esta forma surge un nuevo mecanismo de *scattering*, el *scattering* debido a la rugosidad superficial.

Para describir la *interface* rugosa a partir de la *interface* plana del hamiltoniano no perturbado se define una función $\Delta(\vec{r}_{\parallel})$ que indicará la desviación de la primera *interface* respecto a la segunda. Dicha función está definida en el plano XY, perpendicular a la dirección de confinamiento en el sistema de referencia que se ha usado en este trabajo. Si es positiva indica que el óxido se adentra en la capa de Si, y viceversa si es negativa. Como ejemplo, la Figura 4.5 muestra dos *interfaces*: la primera es plana, mientras que la segunda representa una modificación de la primera a la que se le ha añadido la rugosidad usando una función aleatoria arbitraria $\Delta(\vec{r}_{\parallel})$.

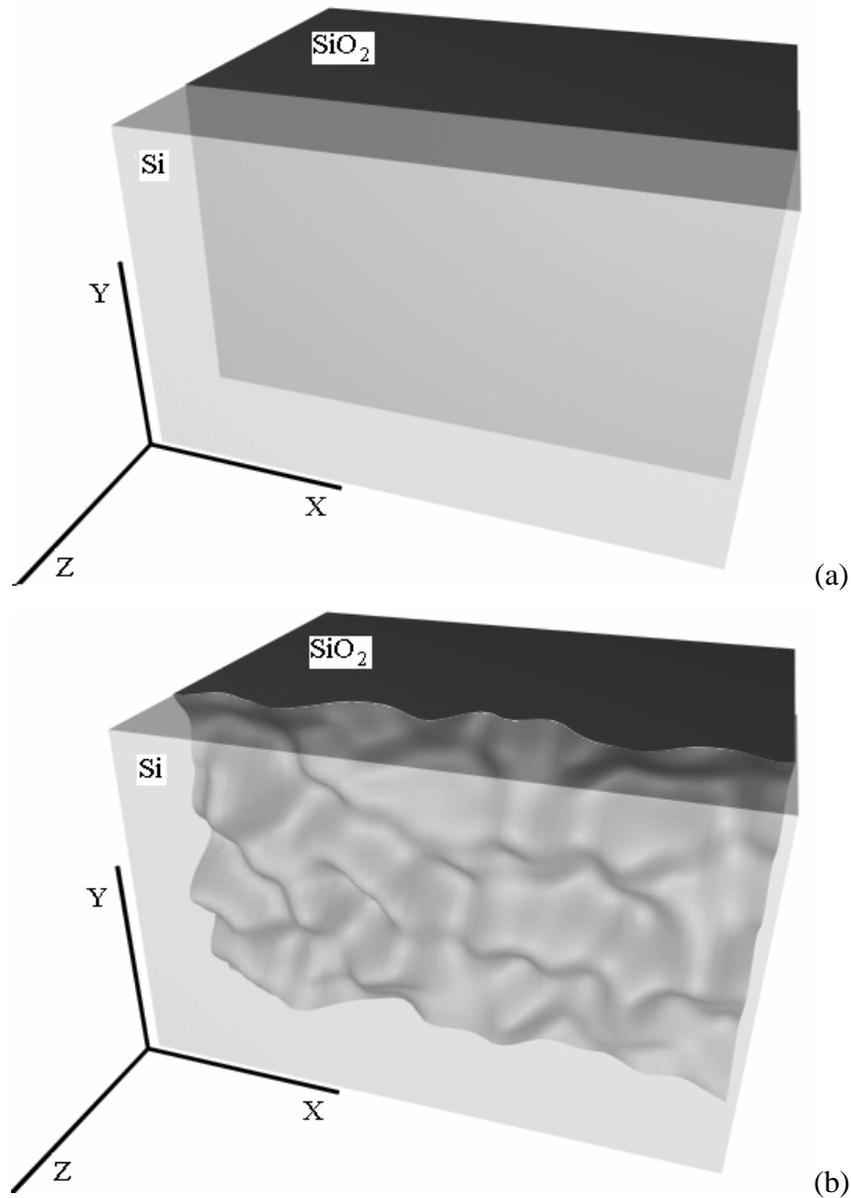


Figura 4.5: Representación esquemática de una *interface* entre Si y SiO₂ plana (a) y rugosa (b).

Ya que la función $\Delta(\vec{r}_{\parallel})$ desempeña un papel esencial en la investigación del *scattering* debido a la rugosidad superficial, su determinación es una cuestión de enorme interés. En las primeras investigaciones sobre este mecanismo de *scattering*, cuando aún no se conocía la forma de la rugosidad superficial de la *interface*, los estudios se apoyaban en postulados acerca de las funciones $\square(\vec{r}_{\parallel})$ [Ando, 1982]. Posteriormente fue posible estimar experimentalmente una forma mucho más realista de la función $\square(\vec{r}_{\parallel})$ usando la

Microscopía de Transmisión de Electrones de Alta Resolución (HRTEM) [Goodnick, 1985]. Desde entonces muchos autores han basado sus estudios en los resultados de este último trabajo [Gámiz, 1999a]. En este trabajo también se ha optado por usar este modelo de rugosidad superficial de la *interface* Si-SiO₂.

Para comenzar el cálculo de las tasas de *scattering* debido a la rugosidad superficial es necesario formular la perturbación del hamiltoniano, que está estrechamente vinculada a la función $\Delta(\vec{r}_{\parallel})$. Para el estudio de transistores basados en la estructura MOS, Goodnick *et al.* [Goodnick, 1985] propusieron que el potencial electrostático en un punto del interior de la capa de Si de coordenadas (\vec{r}_{\parallel}, z) podía aproximarse usando el teorema de Taylor del siguiente modo:

$$V(z + \Delta(\vec{r}_{\parallel})) \approx V(z) + \Delta(\vec{r}_{\parallel}) \frac{\partial V}{\partial z} \quad (4.86)$$

A partir de esta aproximación se obtiene la perturbación del hamiltoniano debida a la rugosidad superficial, que para los huecos es:

$$H'_{RS} \approx |e| [V(z + \Delta(\vec{r}_{\parallel})) - V(z)] \approx |e| \Delta(\vec{r}_{\parallel}) \frac{\partial V}{\partial z} = |e| \Delta(\vec{r}_{\parallel}) [-\vec{E} \cdot \hat{z}] \quad (4.87)$$

siendo \vec{E} el vector campo eléctrico y \hat{z} el vector unitario en la dirección del eje Z. Así pues, la perturbación del hamiltoniano propuesta por Goodnick *et al.* está relacionada con el valor del campo eléctrico.

Sin embargo, aunque esta propuesta proporciona buenos resultados en la descripción de la física de transistores basados en la estructura MOS, no es una buena aproximación para el estudio de dispositivos donde la capa de Si tiene un espesor pequeño [Gámiz, 1999a], y se requiere un modelo más adecuado para el estudio de transistores basados en la estructura SOI. Con esta idea, Gámiz *et al.* propusieron una nueva forma de la perturbación del potencial electrostático que está en consonancia con lo que se observa en una estructura SOI [Gámiz, 1999a]:

$$V(z + \Delta(\vec{r}_{\parallel})) \approx V(z) + \frac{V(z + \Delta_m) - V(z)}{\Delta_m} \Delta(\vec{r}_{\parallel}) \quad (4.88)$$

Siendo Δ_m el valor cuadrático medio de la función de rugosidad $\Delta(\vec{r}_{\parallel})$. De esta forma, el hamiltoniano de la perturbación es

$$H'_{RS} = |e| \frac{V(z + \Delta_m) - V(z)}{\Delta_m} \bigg|_{\vec{r}_{\parallel}} = |e| \frac{\Delta V_m(z)}{\Delta_m} \bigg|_{\vec{r}_{\parallel}} \quad (4.89)$$

donde se ha usado la siguiente definición:

$$\Delta V_m(z) = V(z + \Delta_m) - V(z) \quad (4.90)$$

Esta aproximación proporciona una descripción adecuada de la perturbación del hamiltoniano debida a la rugosidad superficial en una estructura SOI tanto para la *interface* de puerta como para la del óxido enterrado. Según los ejemplos mostrados por Gámiz *et al.*, hay una gran similitud entre el potencial electrostático calculado exactamente y el estimado usando la perturbación de la ecuación (4.88). Sin embargo, el potencial de Goodnick *et al.* en (4.86) muestra importantes diferencias con el potencial exacto. Estas evidencias apoyan el uso del modelo de Gámiz *et al.* en detrimento del de Goodnick *et al.* para la estimación de las tasas de *scattering* debido a la rugosidad superficial en transistores SOI. En este trabajo se han desarrollado las tasas de *scattering* de acuerdo con este modelo de manera que se pueda disponer de ellas en el futuro para posibles investigaciones sobre estos dispositivos.

Para calcular estas tasas de *scattering* considerando el modelo de banda de valencia expuesto en este trabajo partimos de la Regla de Oro de Fermi, ecuación (4.16). La parte fundamental del desarrollo es el estudio del elemento $\langle \vec{k}', c' | H'_{RS} | \vec{k}, c \rangle$. Usando las funciones de onda de los portadores que ya se han usado en apartados anteriores, ecuación (4.19), se obtiene

$$\langle \vec{k}'_{\parallel}, f | H'_{RS} | \vec{k}_{\parallel}, i \rangle = \frac{|e| l_{c.u.}}{\Delta_m N_{\parallel}} \int u_{f,0}^*(\vec{r}) u_{i,0}(\vec{r}) e^{i(\vec{k}'_{\parallel} - \vec{k}_{\parallel}) \cdot \vec{r}_{\parallel}} \bigg|_{\vec{r}_{\parallel}} \int_{\Delta_m}^* V_m(z) \bigg|_i(z) d\vec{r} \quad (4.91)$$

La rugosidad superficial $\Delta(\vec{r}_{\parallel})$ se sustituye usando la siguiente relación basada en su transformada de Fourier, $\Delta(\vec{q}_{\parallel})$

$$\Delta(\vec{r}_{\parallel}) = \frac{1}{\sqrt{S_{\parallel}}} \int \Delta(\vec{q}_{\parallel}) e^{i\vec{q}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel}} d\vec{q}_{\parallel} \quad (4.92)$$

siendo S_{\parallel} la superficie de la *interface*, \vec{q}_{\parallel} las frecuencias espaciales de la rugosidad superficial en el espacio recíproco y $d\vec{q}_{\parallel}$ el diferencial de área en el mismo.

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}'_{\parallel}, f | H_{RS} | \vec{k}_{\parallel}, i \rangle &= \frac{|e|}{\Omega_m} \frac{l_{c.u.}}{N_{\parallel} \sqrt{S_{\parallel}}} \times \\ &\times \int u_{f,0}^*(\vec{r}) u_{i,0}(\vec{r}) e^{i(\vec{k}'_{\parallel} - \vec{k}_{\parallel} + \vec{q}_{\parallel}) \cdot \vec{r}} \Omega_f^*(z) V_m(z) \Omega_i(z) d\vec{r} d\vec{q}_{\parallel} \end{aligned} \quad (4.93)$$

Al igual que se hizo en el estudio de las tasas de *scattering* con fonones, a continuación se realizan los siguientes cambios de variable: $\vec{r} = \vec{r}_{\parallel} + z\hat{k}$; $\vec{r}' = \vec{R}_{\parallel} + \vec{r}_{\parallel}'$; $z\hat{k} = R_z\hat{k} + r_z''\hat{k}$, siendo \vec{R}_{\parallel} y $R_z\hat{k}$ vectores de la red directa y \vec{r}_{\parallel}' y $r_z''\hat{k}$ vectores que variarán dentro de la celda unidad. De esta forma la integral espacial se transforma en

$$\begin{aligned} &\int u_{f,0}^*(\vec{r}) u_{i,0}(\vec{r}) e^{i(\vec{k}'_{\parallel} - \vec{k}_{\parallel} + \vec{q}_{\parallel}) \cdot \vec{r}} \Omega_f^*(z) V_m(z) \Omega_i(z) d\vec{r} = \\ &= \sum_{\vec{R}_{\parallel}} \sum_{R_z, c.u.} \int u_{f,0}^*(\vec{R}_{\parallel} + R_z\hat{k} + \vec{r}_{\parallel}' + r_z''\hat{k}) u_{i,0}(\vec{R}_{\parallel} + R_z\hat{k} + \vec{r}_{\parallel}' + r_z''\hat{k}) \times \\ &\times e^{-i(\vec{k}'_{\parallel} - \vec{k}_{\parallel} - \vec{q}_{\parallel}) \cdot (\vec{R}_{\parallel} + r_z''\hat{k})} \Omega_f^*(R_z + r_z'') V_m(R_z + r_z'') \Omega_i(R_z + r_z'') d\vec{r}_{\parallel}' dr_z'' \end{aligned} \quad (4.94)$$

Se admite que, dentro de una celda unidad, la variación de las funciones envolventes $\Omega_i(z)$ y del potencial electrostático son despreciables

$$\Omega_f^*(R_z + r_z'') V_m(R_z + r_z'') \Omega_i(R_z + r_z'') \approx \Omega_f^*(R_z) V_m(R_z) \Omega_i(R_z) \quad (4.95)$$

y teniendo en cuenta la periodicidad de las funciones $u_{i,0}(\vec{r})$ se puede aceptar que

$$u_{f,0}^*(\vec{R}_{\parallel} + R_z\hat{k} + \vec{r}_{\parallel}' + r_z''\hat{k}) u_{i,0}(\vec{R}_{\parallel} + R_z\hat{k} + \vec{r}_{\parallel}' + r_z''\hat{k}) \approx u_{f,0}^*(\vec{r}_{\parallel}' + r_z''\hat{k}) u_{i,0}(\vec{r}_{\parallel}' + r_z''\hat{k}) \quad (4.96)$$

El resultado final de estas aproximaciones al incorporarlas en la ecuación (4.94) es

$$\begin{aligned} &\int u_{f,0}^*(\vec{r}) u_{i,0}(\vec{r}) e^{i(\vec{k}'_{\parallel} - \vec{k}_{\parallel} + \vec{q}_{\parallel}) \cdot \vec{r}} \Omega_f^*(z) V_m(z) \Omega_i(z) d\vec{r} \approx \\ &\approx \sum_{\vec{R}_{\parallel}} e^{-i(\vec{k}'_{\parallel} - \vec{k}_{\parallel} - \vec{q}_{\parallel}) \cdot \vec{R}_{\parallel}} \sum_{R_z} \Omega_f^*(R_z) V_m(R_z) \Omega_i(R_z) \times \int_{c.u.} u_{f,0}^*(\vec{r}_{\parallel}' + r_z''\hat{k}) u_{i,0}(\vec{r}_{\parallel}' + r_z''\hat{k}) \times \\ &\times e^{-i(\vec{k}'_{\parallel} - \vec{k}_{\parallel} - \vec{q}_{\parallel}) \cdot (\vec{r}_{\parallel}' + r_z''\hat{k})} d\vec{r}_{\parallel}' dr_z'' \end{aligned} \quad (4.97)$$

El valor de la primera sumatoria viene dado por la ecuación (4.25), que expresa la ley de conservación del momento en el plano perpendicular a la dirección de confinamiento, y que además indica los valores de \vec{q}_{\parallel} que pueden realizar la transición para un par de estados inicial y final cualesquiera. Con respecto a la segunda sumatoria, se transforma en una integral de la misma manera que se hizo en el estudio para los fonones, ecuación (4.26). Por tanto, la ecuación (4.97) queda como

$$\begin{aligned} & \frac{N_{\parallel}}{L_{c.u.}} \int_{\parallel} (\vec{k}'_{\parallel} - \vec{k}_{\parallel} - \vec{q}_{\parallel} - \vec{G}_{\parallel}) \times \int_L^* (z) V_m(z) \int_i(z) dz \times \\ & \times \int_{c.u.}^* (\vec{r}'_{\parallel} + r_z'' \hat{k}) u_{i,0}(\vec{r}'_{\parallel} + r_z'' \hat{k}) e^{-i\vec{G}_{\parallel} \cdot \vec{r}'_{\parallel}} d\vec{r}'_{\parallel} dr_z'' \end{aligned} \quad (4.98)$$

Introduciendo estos resultados en (4.93) obtenemos

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}'_{\parallel}, f | H'_{RS} | \vec{k}_{\parallel}, i \rangle &= \frac{|e|}{\hbar_m \sqrt{S_{\parallel}}} \times \int_L^* (z) V_m(z) \int_i(z) dz \\ & \times \int_{c.u.}^* (\vec{r}'_{\parallel} + r_z'' \hat{k}) u_{i,0}(\vec{r}'_{\parallel} + r_z'' \hat{k}) e^{-i\vec{G}_{\parallel} \cdot \vec{r}'_{\parallel}} d\vec{r}'_{\parallel} dr_z'' \times \int_{\parallel} (\vec{k}'_{\parallel} - \vec{k}_{\parallel} - \vec{q}_{\parallel} - \vec{G}_{\parallel}) \int_{\parallel}(\vec{q}_{\parallel}) d\vec{q}_{\parallel} \end{aligned} \quad (4.99)$$

Finalmente, la última integral se resuelve de forma trivial

$$\int_{\parallel} (\vec{k}'_{\parallel} - \vec{k}_{\parallel} - \vec{q}_{\parallel} - \vec{G}_{\parallel}) \int_{\parallel}(\vec{q}_{\parallel}) d\vec{q}_{\parallel} = \int_{\parallel}(\vec{q}_{\parallel}) \quad (4.100)$$

donde se ha redefinido \vec{q}_{\parallel} como el momento transferido en el *scattering* que satisface la ecuación de conservación correspondiente ya demostrada. Usando el valor calculado para el elemento de matriz, la probabilidad por unidad de tiempo de sufrir un *scattering* debido a la rugosidad superficial es

$$P^{RS}(\vec{k}'_{\parallel}, i; \vec{k}_{\parallel}, f) = \frac{2\pi |e|^2 \int_{\parallel}(\vec{q}_{\parallel})^2}{\hbar^2 m S_{\parallel}} G_{2D,0}^{i,f} \left| \int_L^* (z) V_m(z) \int_i(z) dz \right|^2 (E' - E) \quad (4.101)$$

Apréciase que en esta expresión aparece la función $G_{2D,0}^{i,f}$ evaluada para $q_z = 0$. El desarrollo de las tasas de *scattering* de fonones y de rugosidad superficial sugiere que siempre que el portador sufra un *scattering* debido a un agente tridimensional (como es el caso de los fonones), la función de solapamiento tendrá la forma $G_{2D,q_z}^{i,f}$, mientras que en aquellos mecanismos de *scattering* cuyo agente sea esencialmente bidimensional (como la rugosidad superficial) la función de solapamiento será igual a la tridimensional evaluada en $q_z = 0$.

Para calcular las tasas de *scattering*, se integra en todos los posibles estados finales del portador. Éstos están contenidos en un plano del espacio K , y por tanto en el cálculo será necesario usar la densidad de estados en el mismo, $S_{\parallel}/(2\pi)^2$

$$P_{i \rightarrow f}^{RS}(\vec{k}_{\parallel}) = \frac{|e|^2}{2\pi \hbar^2 m} \left| \int_L^* (z) V_m(z) \int_i(z) dz \right|^2 \int_{\parallel}(\vec{q}_{\parallel})^2 G_{2D,0}^{i,f} (E' - E) k'_{\parallel} dk'_{\parallel} \quad (4.102)$$

A continuación se realiza el cambio de variable mostrado en la ecuación (4.4), que transforma la anterior integral en k_{\parallel}' en una integral en la energía total final del portador, E' . La integración en esta variable es sencilla, ya que la única parte del integrando que depende de la misma es la delta de Dirac. Físicamente esta integración implica la conservación de la energía total del portador en el proceso de *scattering*. Conviene recordar por tanto que a lo largo del cálculo se han encontrado dos leyes de conservación para el *scattering* debido a la rugosidad superficial: la conservación del momento en el plano paralelo a la *interface*, ecuación (4.100), y la conservación de la energía total del portador que se acaba de ver.

Como resultado de dichas leyes de conservación, para un determinado estado inicial el vector \vec{q}_{\parallel} es únicamente función del ángulo de *scattering* θ (ángulo entre el vector de onda paralelo inicial \vec{k}_{\parallel} y el vector de onda paralelo final \vec{k}_{\parallel}'), y por consiguiente, $|\vec{q}_{\parallel}|^2$ dependerá del mismo. Además, las funciones $G_{2D,0}^{i,f}$ podrían depender también del ángulo θ , al igual que sus correspondientes tridimensionales. Se tiene entonces

$$P_{i0 f}^{RS}(\vec{k}_{\parallel}) = \frac{|e|^2}{2\pi\hbar} \frac{m_f}{m} \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_L^* V_m(z) \psi_i(z) dz \right|^2 \sqrt{\psi_f(E - V_f)} \psi_f(E - V_f) \times \int |\vec{q}_{\parallel}|^2 G_{2D,0}^{i,f} d\theta \quad (4.103)$$

En este punto se puede extraer la probabilidad angular de *scattering* debido a la rugosidad superficial a partir de la anterior ecuación. Cuando no se realiza la integración angular, se obtiene

$$P_{i0 f}^{RS}(\theta) = |\vec{q}_{\parallel}|^2 G_{2D,0}^{i,f} \quad (4.104)$$

Ya que las funciones $G_{2D,0}^{i,f}$ no son conocidas, en este trabajo se aproximan por funciones isotropas según la ecuación (4.36). Así, la probabilidad angular de *scattering* se reduce a

$$P_{i0 f}^{RS}(\theta) = |\vec{q}_{\parallel}|^2 \quad (4.105)$$

Continuando con el cálculo de las tasas de *scattering* debido a la rugosidad superficial, y teniendo en cuenta la ecuación (4.37), podremos acotar el valor de la integral de la ecuación (4.103) por

$$0 \leq \int_{\square} |\tilde{q}_{\parallel}|^2 G_{2D,0}^{i,f} d\square \leq \int_{\square} (\tilde{q}_{\parallel})^2 d\square \quad (4.106)$$

y de esta forma en cada caso es posible encontrar un \square que verifique que $0 \leq \square \leq 1$ tal que

$$\int_{\square} |\tilde{q}_{\parallel}|^2 G_{2D,0}^{i,f}(\square) d\square = \square \int_{\square} (\tilde{q}_{\parallel})^2 d\square \quad (4.107)$$

Hasta esta igualdad se puede llegar sin aproximaciones, aunque hay que resaltar que el desconocimiento de las funciones $G_{2D,0}^{i,f}$ hace igualmente desconocidos los valores adecuados de los parámetros \square . No obstante, siendo consistentes con la hipótesis que se realizó para las funciones $G_{2D,q_z}^{i,f}$ en el caso del *scattering* con fonones, sería adecuado admitir $\square = \square$. Las tasas de *scattering* con la rugosidad superficial son, finalmente

$$P_{i \rightarrow f}^{RS}(E) = \frac{|e|^2 \square m_f}{2\pi \square^2 \hbar^3} \left| \int_L^* \tilde{q}_{\parallel}(z) V_m(z) \tilde{q}_{\parallel}(z) dz \right|^2 \sqrt{\square_f(E - V_f)} \square_f(E - V_f) \times \int_{\square} (\tilde{q}_{\parallel})^2 d\square \quad (4.108)$$

Hasta el momento no se ha mencionado la forma de la función $|\square (\tilde{q}_{\parallel})|^2$, por lo que la ecuación anterior no está vinculada a un tipo particular de rugosidad superficial, y es una expresión general. Admitiendo el modelo de rugosidad superficial de Goodnick *et al.* [Goodnick, 1985] usado por muchos autores y basado en estudios experimentales, admitiremos que la rugosidad superficial de la *interface* entre Si y SiO₂ da lugar a la siguiente expresión de $|\square (\tilde{q}_{\parallel})|^2$

$$|\square (\tilde{q}_{\parallel})|^2 = \frac{\pi \square_m^2 L_{corr}^2}{\square \left[1 + \frac{q^2 L_{corr}^2}{2} \right]^{3/2}} \quad (4.109)$$

donde L_{corr} es la longitud de correlación de la rugosidad superficial. Por tanto las tasas de *scattering* obtenidas con este modelo son

$$P_{i \rightarrow f}^{RS}(E) = \frac{|e|^2 \square L_{corr}^2 m_f}{2\hbar^3} \left| \int_L^* \tilde{q}_{\parallel}(z) V_m(z) \tilde{q}_{\parallel}(z) dz \right|^2 \sqrt{\square_f(E - V_f)} \square_f(E - V_f) \times \int_0^{2\pi} \frac{1}{\square \left[1 + \frac{q^2 L_{corr}^2}{2} \right]^{3/2}} d\square \quad (4.110)$$

La ecuación (4.110) se transforma en la expresión de la tasa de *scattering* debido a la rugosidad superficial que proporcionan Gámiz *et al.* [Gámiz, 1999a] cuando se elimina la no parabolicidad de la banda ($\epsilon(\epsilon) = 1; \epsilon(\epsilon) = 1$) y se supone que $\epsilon = 1$. Esta última ecuación no considera el apantallamiento que realiza el resto de portadores del semiconductor. Con respecto a esta cuestión, Gámiz *et al.* incorporan este apantallamiento introduciendo *ad hoc* una función $\epsilon(\vec{q})$

$$\epsilon(\vec{q}) = 1 + \frac{|e|^2}{2\epsilon_s q \pi \hbar^2} \hat{F}(q) \quad (4.111)$$

siendo ϵ_s la constante dieléctrica del semiconductor y $\hat{F}(q)$ la función definida como

$$\hat{F}(q) = \sum_{\alpha} \left[m_{\alpha} \iint_{\alpha} |z|^2 |z'|^2 e^{-q|z-z'|} dz dz' \right] \quad (4.112)$$

donde el índice de la sumatoria α recorre todas las bandas consideradas en el estudio. La introducción de la función $\epsilon(\vec{q})$ en la ecuación (4.110), un procedimiento propuesto primeramente por Yamakawa [Yamakawa, 1996], ha de entenderse como una primera aproximación para tener en cuenta el apantallamiento del resto de portadores, ya que cuando se pretende usarla más allá de sus límites de validez puede presentar ciertos comportamientos no físicos. Incorporando los efectos del apantallamiento en las probabilidades de *scattering* con la rugosidad superficial, se obtiene la siguiente expresión:

$$P_{\alpha_f}^{RS}(E) = \frac{|e|^2 \epsilon_s^2 L_{corr}^2 m_f}{2\hbar^3} \left| \int_L^* V_m(z) V_i(z) dz \right|^2 \sqrt{\epsilon_f(E - V_f)} \epsilon_f(E - V_f) \times \int_0^{2\pi} \frac{1}{\epsilon(q) \left[1 + \frac{q^2 L_{corr}^2}{2} \right]^{3/2}} d\theta \quad (4.113)$$

En estas probabilidades se tienen hasta tres parámetros diferentes que se pueden usar como parámetros de ajuste cuando éstos nos sean desconocidos, a saber, ϵ , L_{corr} y Δ_m . Éste último aparece implícitamente en la expresión anterior dentro de la función $V_m(z)$.

En la estructura MOS convencional los *scatterings* debidos a la rugosidad superficial estan causados, fundamentalmente, por la única *interface* Si-SiO₂. En el caso de una estructura SOI, que es para la que se han desarrollado las tasas de *scattering* anteriores,

existen dos *interfaces* distintas de este mismo tipo, la *interface* de puerta y la *interface* con el óxido enterrado. Cada una de ellas producirá *scatterings* en el portador durante su vuelo libre. En los apartados siguientes se mostrará el procedimiento de cálculo de las tasas de *scattering* de una y otra *interface* admitiendo que no existe correlación entre ambas [Gámiz, 1999a].

4.4.4 Tasas de scattering debido a la rugosidad de puerta

Para particularizar la ecuación (4.113) en una determinada *interface* es necesario considerar los valores de los parámetros L_{corr} y Δ_m que describen su rugosidad. Además se requiere calcular el término $\left| \int_L^* (z) \square V_m(z) \square_i(z) dz \right|^2$ que contiene la información sobre las fluctuaciones del potencial en la dirección de confinamiento debidas a los cambios en la posición de la *interface* de puerta. Para ello es necesario calcular $\Delta V_m(z)$ a partir de su definición en la ecuación (4.90). Esta función es la diferencia entre dos potenciales electrostáticos: $V(z)$, que es el potencial electrostático en la estructura no perturbada, y $V(z + \Delta_m)$, que es el potencial electrostático en la estructura cuando la *interface* en cuestión se desplaza una distancia Δ_m . Para estimarlos, se acepta como condición de contorno que la caída de tensión entre el óxido de puerta y el óxido enterrado es la misma en ambos casos.

Para ejemplificar el procedimiento de cálculo, en la Figura 4.6 se ha dibujado esquemáticamente una estructura SOI con una función de rugosidad arbitraria. Se ha representado los potenciales electrostáticos $V(z)$ y $V(z + \Delta_m)$ correspondientes al modelo de pozo triangular que se ha usado en este trabajo. $V(z)$ es el potencial de la estructura sin rugosidad, calculado en una lámina de Si de espesor L . Aumentando la anchura de la lámina a un espesor $L + \Delta_m$ se calcula el potencial $V(z + \Delta_m)$ según el procedimiento de

Gámiz *et al.* [Gámiz, 1999a]. La *interface* entre el Si y el óxido enterrado se considera lisa en el cálculo de las tasas de *scattering* debido a la rugosidad superficial de la *interface* del óxido de puerta. Esto es así porque en este estudio se considera que los mecanismos de *scattering* asociados a la rugosidad de cada una de las *interfaces* están desacoplados. Finalmente, la función $\Delta V_m(z)$ se calcula restando los dos potenciales en la región espacial que ocupa la lámina de Si en la estructura no perturbada, y se resuelve la integral anterior.

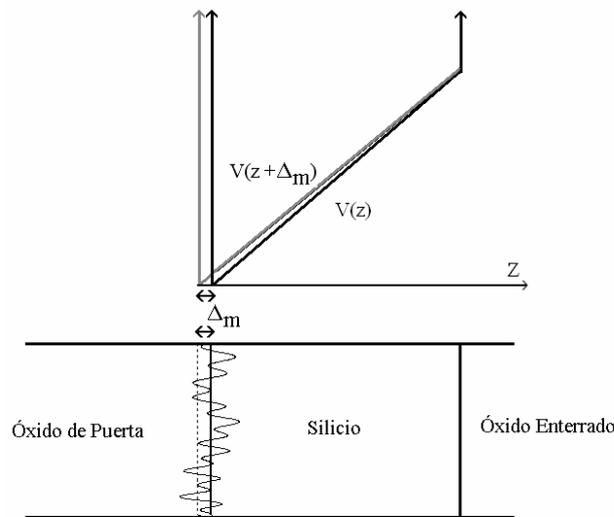


Figura 4.6: Representación esquemática del potencial electrostático en una estructura SOI sin rugosidad de puerta (línea oscura) y con rugosidad (línea gris). La línea discontinua en la estructura indica el valor cuadrático medio de la función de rugosidad que se ha ilustrado.

4.4.5 Tasas de scattering debido a la rugosidad del óxido enterrado

Para estimar las tasas de *scattering* debido a la rugosidad de la *interface* entre la lámina de Si y el óxido enterrado se han de considerar sus correspondientes valores de L_{corr} y Δ_m . Por lo general, ya que la *interface* entre el Si y el óxido enterrado es del mismo tipo que la de puerta, se suele admitir que los valores del óxido enterrado son iguales en ambos casos.

Además, es necesario estimar $\left| \int_L f^*(z) V_m(z) i(z) dz \right|^2$ para este mecanismo de *scattering*.

El procedimiento de cálculo es similar al que se ha explicado en la sección anterior para la *interface* de puerta, con la única diferencia de que la función $\Delta V_m(z)$ se obtiene como diferencia del potencial de la estructura no perturbada y el potencial de la estructura con la *interface* del óxido enterrado desplazada una distancia Δ_m .

Para ejemplificar el cálculo, en la Figura 4.7 se muestra un esquema de una estructura SOI con una función de rugosidad arbitraria en la *interface* del óxido enterrado. El potencial $V(z + \Delta_m)$ se obtiene considerando un aumento de Δ_m en la anchura de la lámina de Si. Para este mecanismo de *scattering*, la *interface* entre el Si y el óxido de la puerta se considera lisa, ya que no se tiene en cuenta la posibilidad de acoplamiento entre las rugosidades de las dos *interfaces*. Finalmente se evalúa $V_m(z)$ en la región espacial que ocupa la lámina de Si en la estructura no perturbada, y se resuelve la integral.

Aunque en ambos mecanismos de *scattering* la perturbación se estima de manera semejante, aumentando la anchura de la lámina de Si una distancia Δ_m , el hecho de que este

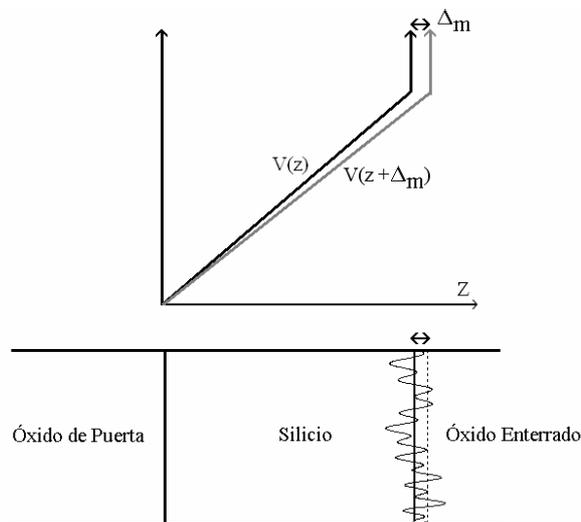


Figura 4.7: Representación esquemática del potencial electrostático en una estructura SOI sin rugosidad en la *interface* del óxido enterrado (línea oscura) y con rugosidad (línea gris). La línea discontinua en la estructura indica el valor cuadrático medio de la función de rugosidad que se ha ilustrado.

aumento se realice en *interfaces* diferentes implica que la función $\Delta V_m(z)$ sea distinta en cada caso, tomando sus valores mayores en las cercanías de la *interface* perturbada.

4.5 Resultados

En este apartado se muestran los resultados obtenidos al implementar las tasas de *scattering* bidimensionales desarrolladas en este trabajo, que tienen en cuenta el efecto de la no parabolicidad de la banda tanto en su desarrollo como en las funciones de onda que se emplean en las mismas y que han sido obtenidas de la resolución de la ecuación de Schrödinger de masa efectiva en el dispositivo considerando la no parabolicidad de la banda.

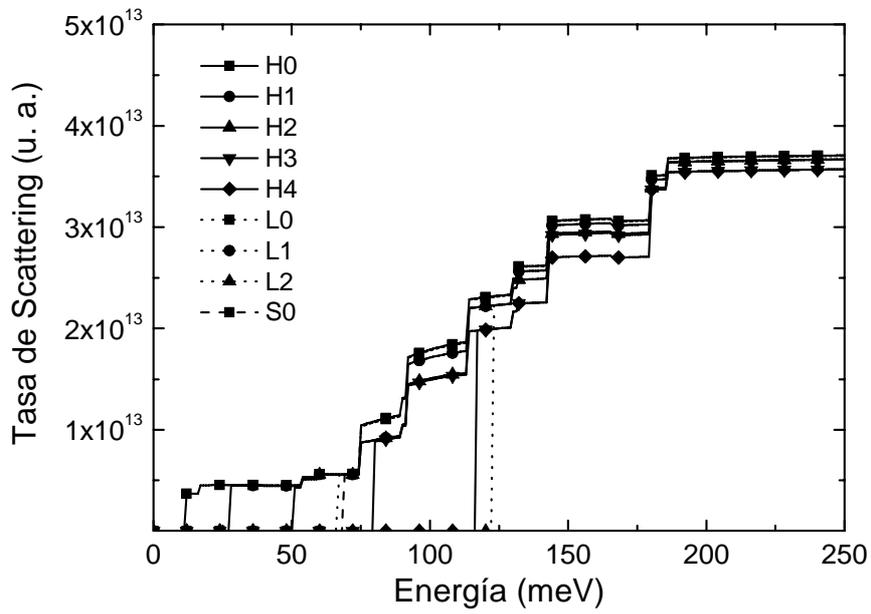
En primer lugar se muestran las tasas de *scattering* bidimensionales en una estructura de tipo SOI, modelada como un pozo triangular infinito de Si de 10 nm de espesor con un campo eléctrico transversal aplicado de 10 kV/cm. Dichas tasas de *scattering* fueron calculadas para transiciones entre los estados del conjunto de subbandas 531 referido en la sección 4.3.3. No obstante, las tasas de *scattering* exactas deberían contener la contribución de las infinitas subbandas que componen la estructura, labor que es impracticable, y por consiguiente las tasas de *scattering* mostradas, aunque son suficientemente precisas para hacer un estudio de la dinámica de los portadores, pueden presentar comportamientos especiales para energías altas que deben ser aclarados antes de comenzar su estudio. Un ejemplo de éstos se observará en algunos casos, en los que a partir de una cierta energía, las tasas de *scattering* mantienen un valor prácticamente constante. Esta circunstancia podría indicar que ya se han considerado todas las transiciones posibles entre las subbandas del conjunto 531, y por ello las tasas de *scattering* despreciarían cualquier transición a las nuevas bandas que serían accesibles desde dichas energías.

Para conocer con precisión el valor de las tasas de *scattering* es necesario realizar un profundo análisis del transporte en la estructura simulada y establecer una comparación con resultados experimentales para ajustar los valores de los parámetros ω (fonones ópticos), ω_0 (fonones acústicos) y μ . No obstante, hemos optado por estudiar los comportamientos de las tasas de *scattering* usando unidades arbitrarias, dejando para un posterior trabajo la

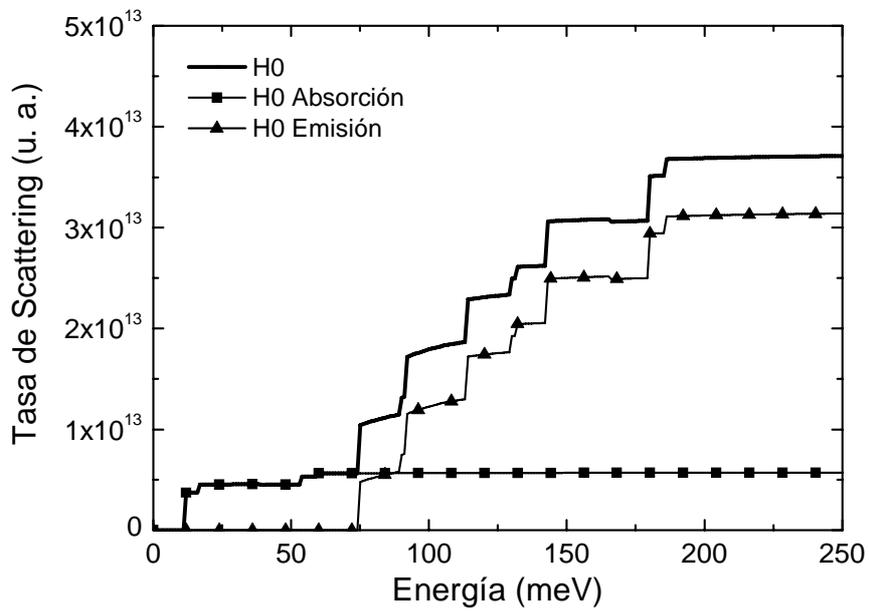
labor de ajuste de los parámetros. Por ello, en principio se ha asignado a los mismos los valores correspondientes a las tasas tridimensionales: $\Gamma = D^*$, $\Gamma = \Gamma_0^*$ y $\Gamma = 1$.

La Figura 4.8(a) muestra las tasas totales de scattering bidimensionales con fonones ópticos para el conjunto de subbandas 531. Cada una de las curvas representa la suma de todas las tasas de scattering con fonones ópticos de un portador cuyo estado inicial se encuentra en la subbanda indicada en la leyenda, y cuyo estado final es cualquiera de los permitidos por el mecanismo de *scattering* perteneciente al conjunto 531. En la figura se observa el escalonado característico de las tasas de *scattering* bidimensionales como consecuencia de las discontinuidades de la densidad de estados, y como se puede observar, en algunos tramos se observa una cierta pendiente en las curvas procedente de la no parabolicidad de las subbandas. Se puede distinguir una importante diferencia entre los valores de las tasas de *scattering* a bajas y altas energías como consecuencia de la alta energía de los fonones ópticos, que provoca que la emisión no sea posible hasta alcanzar energías de unos 80 meV en el caso estudiado, a partir de la cual la emisión es el proceso que comienza a ser dominante. Como ejemplo que ilustra este hecho, en la Figura 4.8(b) se muestra la tasa de *scattering* para los portadores de la subbanda H0 junto con la suma total de tasas de emisión y la suma total de tasas de absorción. La absorción de fonones ópticos toma un valor prácticamente constante, con leves incrementos debidos tanto a la no parabolicidad de la banda como a la presencia de más subbandas a las que el hueco puede acceder absorbiendo un fonón. La emisión, en cambio, aumenta rápidamente a partir de su energía mínima, que coincide con la suma de la energía del fondo de la subbanda H0 y la energía del fonón óptico. Estas características hacen de los fonones ópticos un importante factor de disipación de energía, de manera similar a como actúan en el transporte tridimensional.

Respecto al *scattering* con fonones acústicos, la Figura 4.9(a) muestra las correspondientes tasas de *scattering* bidimensionales para el mismo conjunto de subbandas. En esta figura se observa también el escalonado característico. Sin embargo, debido a los pequeños valores de la energía de los fonones acústicos, la diferencia entre las tasas de emisión y absorción son pequeñas, y por consiguiente no hay una región de energías donde domine la absorción y otra donde lo haga la emisión, sino que ambas son prácticamente igual de importantes en cualquier energía. Por el mismo motivo, tanto la emisión como la

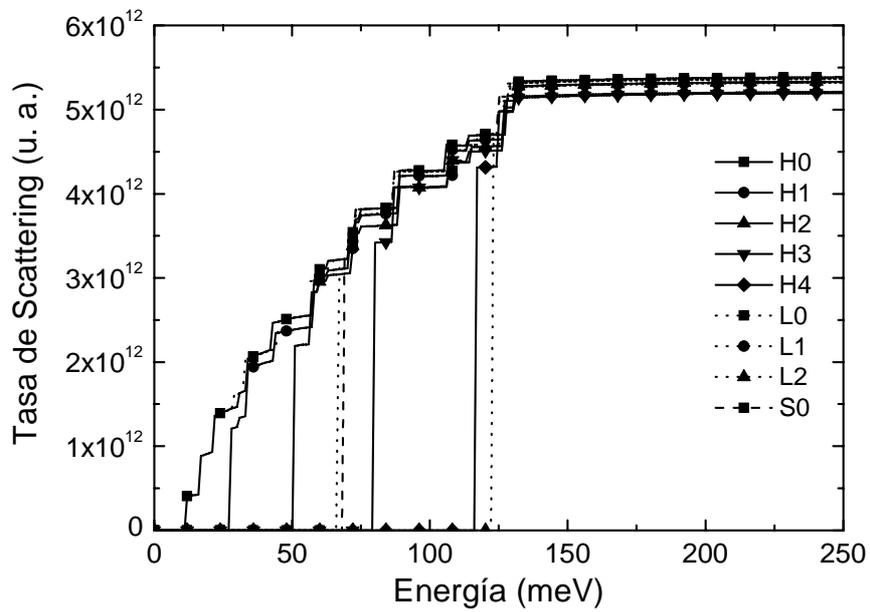


(a)

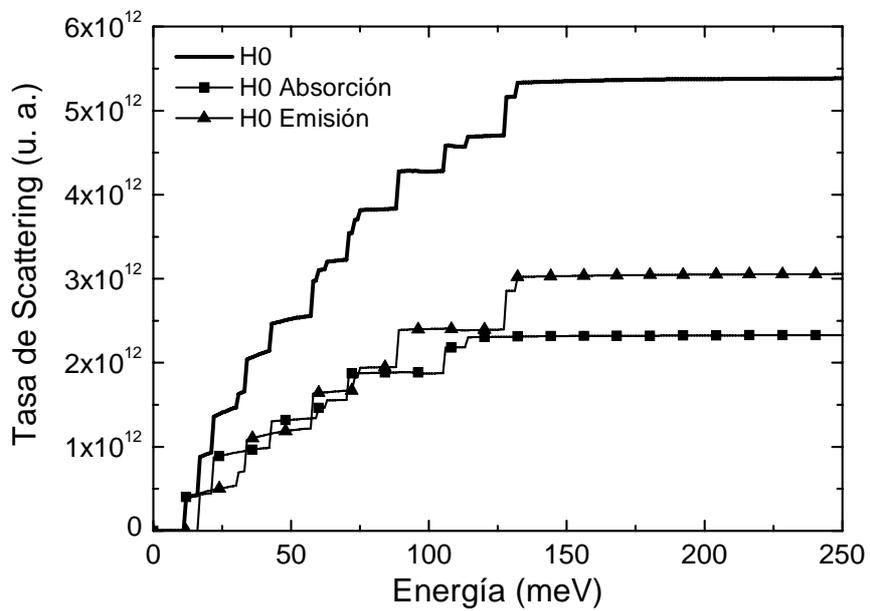


(b)

Figura 4.8: (a) Tasas totales de *scattering* con fonones ópticos en una lámina de Si de 10 nm de espesor con un campo eléctrico aplicado de 10 kV/cm a una temperatura de 300 K para el conjunto de subbandas 531; (b) tasas de absorción y emisión de fonones ópticos de la subbanda H0 junto con la suma de ambas.



(a)



(b)

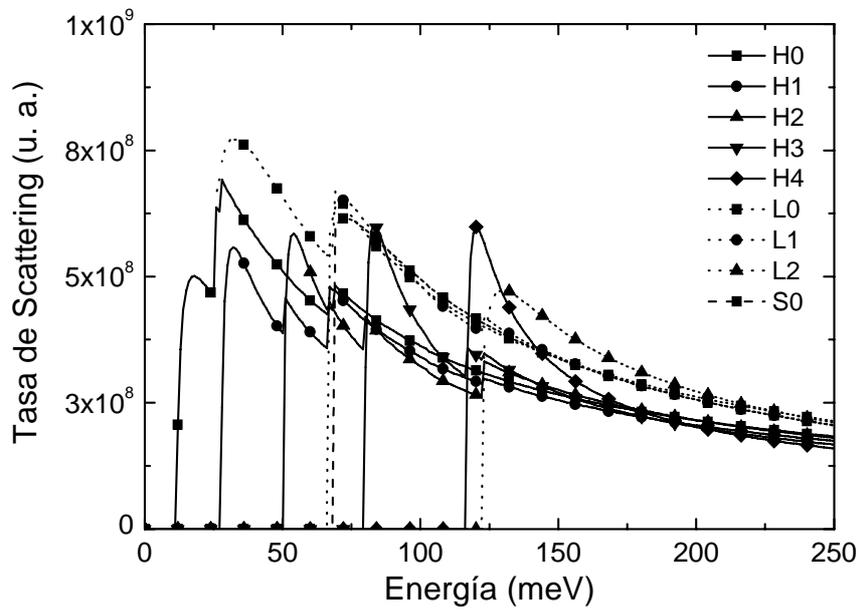
Figura 4.9: (a) Tasas totales de *scattering* con fonones acústicos en una lámina de Si de 10 nm de espesor con un campo eléctrico aplicado de 10 kV/cm a una temperatura de 300 K para el conjunto de subbandas 531; (b) tasas de absorción y emisión de fonones acústicos de la subbanda H0 junto con la suma de ambas.

absorción estarán presentes desde energías muy próximas al fondo de la estructura de bandas, lo que provocará el fuerte aumento de las tasas de *scattering* desde energías muy bajas. La Figura 4.9(b) refleja los comentarios anteriores, mostrando la tasa de *scattering* con fonones acústicos para los portadores en la subbanda H0 junto con la suma de todas las tasas de emisión y todas las de absorción.

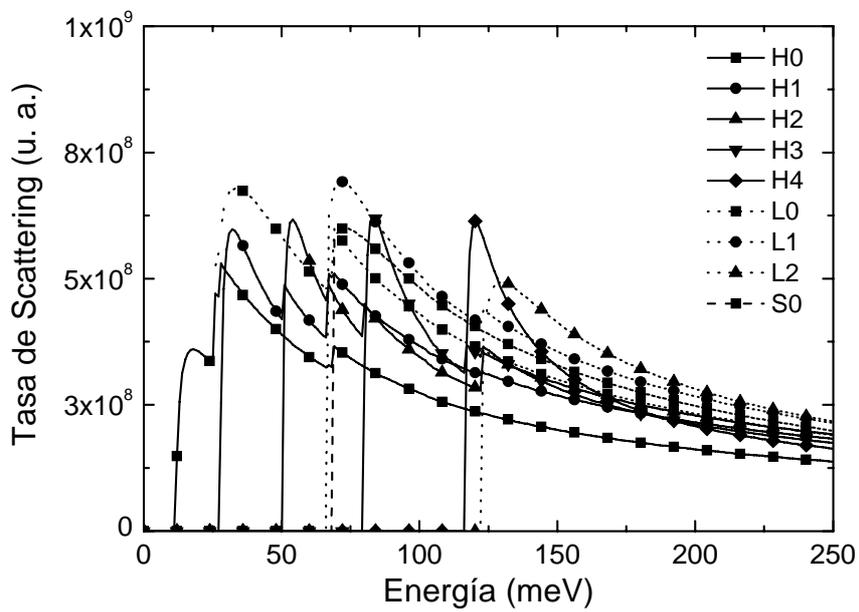
Respecto al *scattering* con fonones acústicos, la Figura 4.9(a) muestra las correspondientes tasas de *scattering* bidimensionales para el mismo conjunto de subbandas. En esta figura se observa también el escalonado característico. Sin embargo, debido a los pequeños valores de la energía de los fonones acústicos, la diferencia entre las tasas de emisión y absorción son pequeñas, y por consiguiente no hay una región de energías donde domine la absorción y otra donde lo haga la emisión, sino que ambas son prácticamente igual de importantes en cualquier energía. Por el mismo motivo, tanto la emisión como la absorción estarán presentes desde energías muy próximas al fondo de la estructura de bandas, lo que provocará el fuerte aumento de las tasas de *scattering* desde energías muy bajas. La Figura 4.9(b) refleja los comentarios anteriores, mostrando la tasa de *scattering* con fonones acústicos para los portadores en la subbanda H0 junto con la suma de todas las tasas de emisión y todas las de absorción.

Respecto a la rugosidad superficial, se han calculado las tasas de *scattering* debido a la *interface* de óxido de puerta y de óxido enterrado. Éstas se han modelado usando unos valores típicos de L_{corr} y σ_m usados en otros trabajos [Gámiz, 1999a], $L_{corr} = 15 \text{ \AA}$ y $\sigma_m = 5 \text{ \AA}$. La Figura 4.10 muestra las tasas de *scattering* para los portadores en cada una de las subbandas del conjunto estudiado. En todos los casos se observa un comportamiento característico: las tasas de *scattering* son crecientes cerca del fondo de las subbandas, alcanzando un máximo, a partir del cual son decrecientes. Esta tendencia sólo es alterada en ciertos casos cuando se rebasa una energía que supera el fondo de una nueva subbanda, donde la posibilidad de nuevas transiciones incrementa las tasas de *scattering* en el entorno de dicha energía. No obstante, la tendencia vuelve a ser decreciente en cuanto se excede en unos cuantos meV el fondo de la nueva subbanda.

Aunque la representación se ha realizado en unidades arbitrarias, es posible comparar las tasas de *scattering* debido a la rugosidad superficial con la puerta y con el óxido enterrado,



(a)



(b)

Figura 4.10: Tasas totales de *scattering* debido a la rugosidad superficial de la *interface* de puerta (a) y óxido enterrado (b) en una lámina de Si de 10 nm de espesor con un campo eléctrico aplicado de 10 kV/cm a una temperatura de 300 K para el conjunto de subbandas 531. La rugosidad se ha modelado usando los valores $L_{corr} = 15 \text{ \AA}$ y $\sigma_m = 5 \text{ \AA}$.

ya que ambas son proporcionales (el único parámetro de ajuste en ambas es α). Las figuras muestran que la rugosidad de puerta es más importante que la del óxido enterrado en las subbandas más bajas, y tienen prácticamente la misma importancia en las subbandas más altas. Un análisis de los valores numéricos muestra que, para estas últimas, las tasas de *scattering* debidas a la rugosidad con el óxido enterrado pueden ser incluso mayores. La justificación de este hecho está en el comportamiento en las funciones envolventes, que influyen en las tasas de *scattering* a través de las integrales de solapamiento. En las subbandas fundamentales (H0, L0 y S0) la función envolvente tiene su centroide más próximo a la *interface* de puerta. Sin embargo, las subbandas excitadas tienen su centroide cada vez más cerca de la *interface* del óxido enterrado, por lo que la rugosidad del mismo tendrá mayor relevancia que la de puerta en estos estados. En el caso estudiado este efecto es pequeño. No obstante, éste se hace más visible cuando se incrementa el valor del campo eléctrico. Se volverá sobre esta cuestión en la sección 4.5.2.

Una vez que se han mostrado las características más importantes de las tasas de *scattering* bidimensionales estudiadas en este trabajo, a continuación se analizará el comportamiento de las tasas de *scattering* en función de la temperatura, del valor del campo eléctrico transversal, de la anchura de la lámina de Si y de los parámetros que definen la rugosidad superficial de la *interface* Si-SiO₂, tanto la correspondiente a la puerta como al óxido enterrado. Finalmente, se hará un estudio sobre cómo afecta el cambio de la dirección cristalina en la que se confinan los portadores a cada uno de los mecanismos tratados en este trabajo.

4.5.1 Efecto de la temperatura

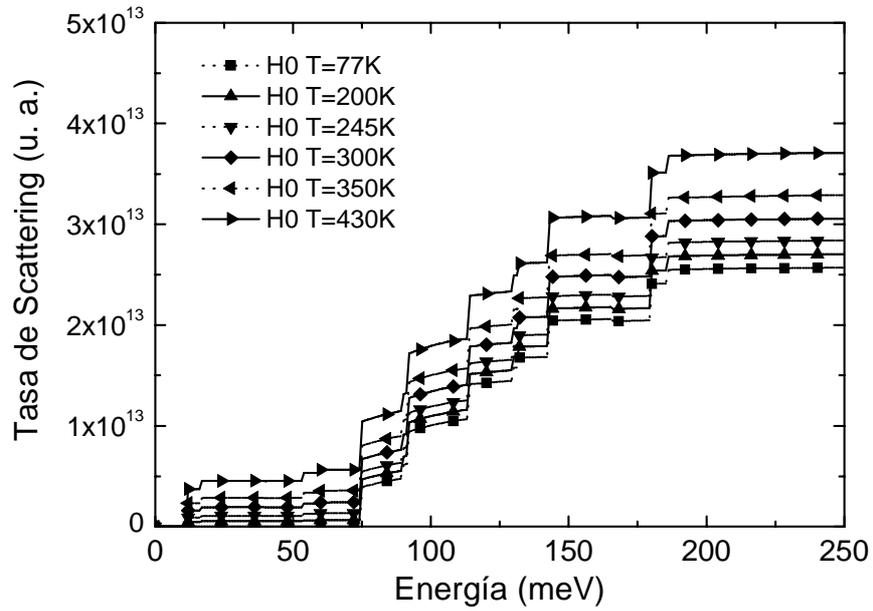
Aunque la temperatura es un factor de gran importancia en las tasas de *scattering* con fonones, puesto que su población en el sistema depende de esta magnitud física, ésta no afecta en modo alguno a las tasas de *scattering* debido a la rugosidad superficial, ya que la temperatura no se tiene en cuenta en el desarrollo teórico de las mismas que se ha llevado a cabo. Por este motivo, en este apartado sólo se analiza el efecto que tiene la temperatura en las tasas de *scattering* con fonones en la estructura SOI que se estudió en el apartado

anterior. Con el propósito de ver la influencia que tiene la forma de la función envolvente del estado en las tasas de *scattering*, en este apartado y en los siguientes se mostrarán los resultados obtenidos para las subbandas H0 y H2 como ejemplos de una subbanda fundamental y una subbanda excitada.

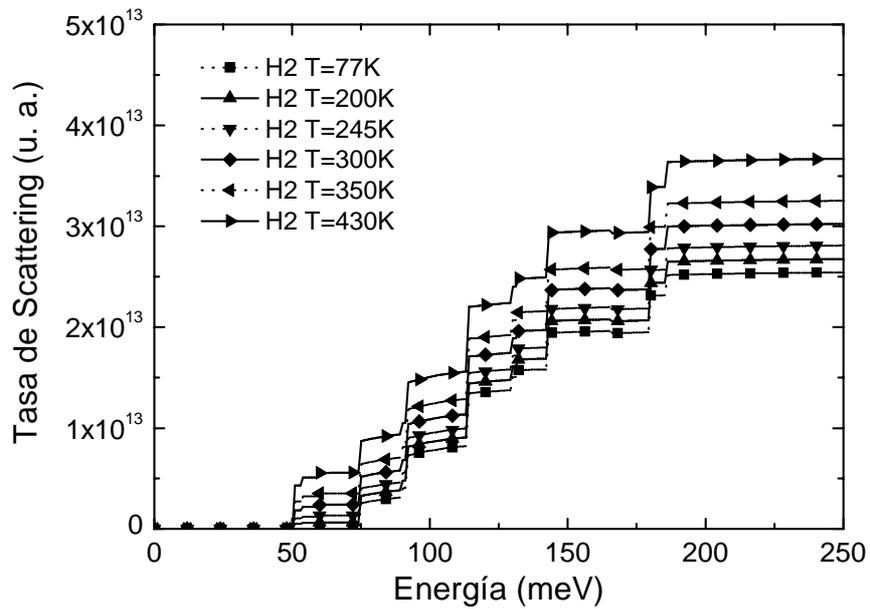
Respecto al *scattering* con fonones ópticos, la Figura 4.11 muestra las tasas totales de *scattering* para los portadores en la subbanda H0 y H2 en un rango de temperaturas que comprende desde 77 K hasta 430 K. Se puede observar que en ambos casos las tasas de *scattering* se incrementan notablemente al aumentar la temperatura, de igual manera a lo que ocurre en el caso tridimensional. A temperaturas menores de 200 K, la tasa de *scattering* en energías más pequeñas que la energía umbral donde comienza la emisión es prácticamente despreciable, indicando este hecho que la agitación térmica debida a los fonones ópticos en los portadores de las subbandas más bajas será poco importante. No obstante, conforme aumenta la temperatura se incrementa la agitación térmica, ya que las tasas de absorción son importantes incluso en las subbandas de menor energía. Por ello, sería razonable que las tasas de *scattering* con fonones ópticos que hemos desarrollado en este trabajo conduzcan a una disminución de la movilidad de los huecos cuando se trabaje a temperaturas cada vez más altas.

Respecto a los fonones acústicos, la Figura 4.12 muestra las tasas de *scattering* para las subbandas H0 y H2. Se observa igualmente que las tasas de *scattering* se incrementan al aumentar la temperatura. Sin embargo, en este caso el incremento es mucho más importante que para los fonones ópticos, siendo las tasas de *scattering* a 430 K notablemente más importantes que a 77 K. Este comportamiento puede justificarse de manera aproximada a partir de la aproximación de equipartición. Ésta, cuando se aplica al estudio del *scattering* con fonones acústicos, admite que $N_q + 1 \approx N_q \approx \frac{k_B T}{\hbar \omega_{acu}}$. Por tanto, las tasas aumentan linealmente con la temperatura.

Debido a que el *scattering* con fonones acústicos es significativo desde energías muy bajas, será un mecanismo muy importante especialmente para el estudio del transporte a medias y bajas temperaturas. Además, el fuerte aumento de las tasas de *scattering* con la temperatura puede implicar una disminución en el valor de la movilidad de los huecos en de la estructura estudiada.

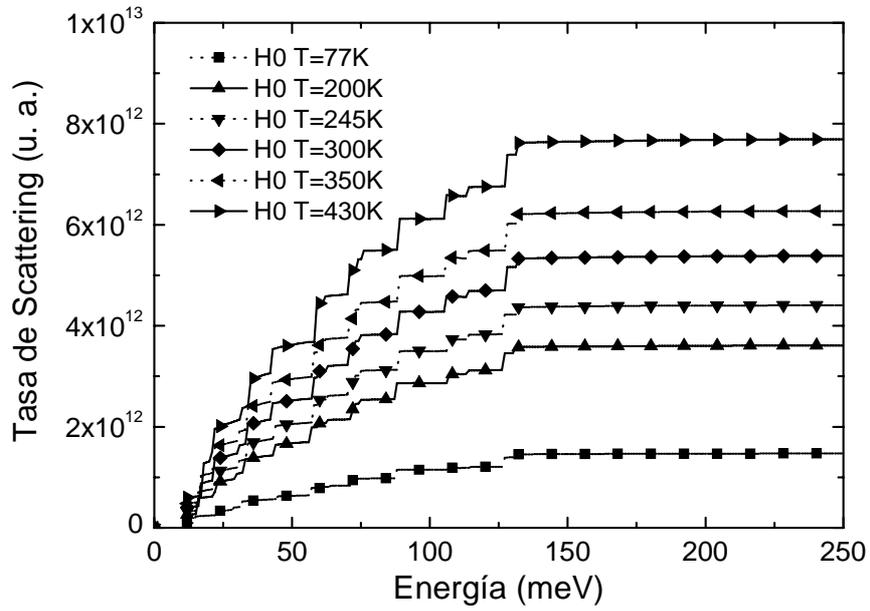


(a)

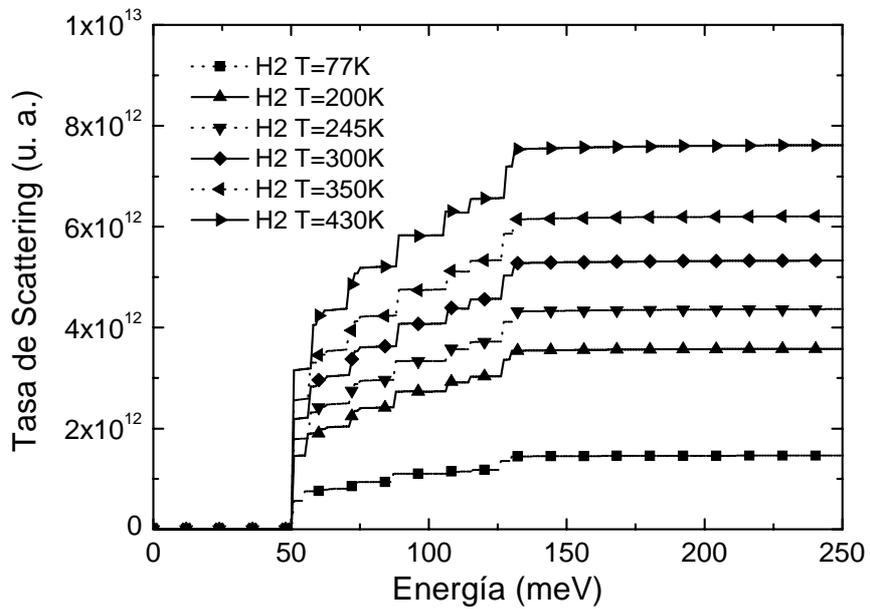


(b)

Figura 4.11: Tasas totales de *scattering* con fonones ópticos en una lámina de Si de 10 nm de espesor con un campo eléctrico aplicado de 10 kV/cm a temperaturas comprendidas entre 77 K y 430 K para las subbandas (a) H0 y (b) H2



(a)



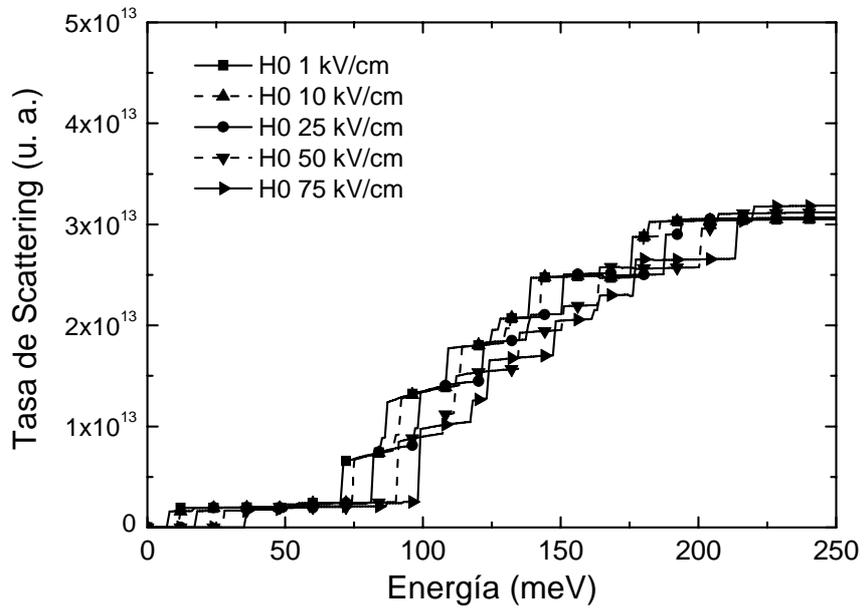
(b)

Figura 4.12: Tasas totales de *scattering* con fonones acústicos en una lámina de Si de 10 nm de espesor con un campo eléctrico aplicado de 10 kV/cm a temperaturas comprendidas entre 77 K y 430 K para las subbandas (a) H0 y (b) H2.

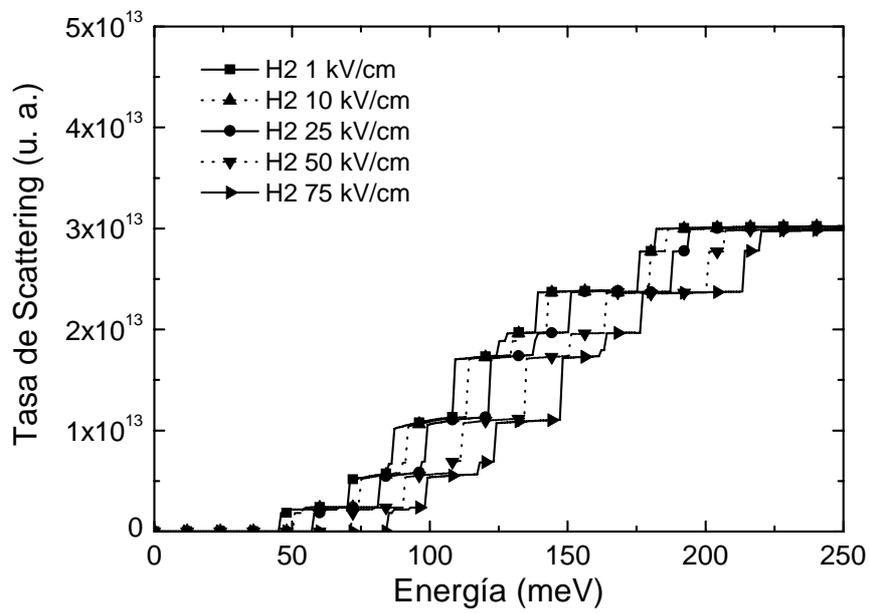
4.5.2 Efecto del campo eléctrico aplicado

El campo eléctrico transversal es una magnitud de gran importancia en el estudio del transporte de los portadores en una estructura de tipo SOI. Sus efectos son fundamentales al resolver la ecuación de Schrödinger de masa efectiva. Un campo eléctrico intenso tiende a elevar la energía de los estados como consecuencia del mayor confinamiento, y además puede desplazar los centroides de las funciones envolventes hacia la *interface* del óxido de puerta o la del óxido enterrado. Estos cambios pueden influir notablemente sobre los valores de las tasas de *scattering* de cada uno de los mecanismos. En este apartado se expone el estudio de cómo influye esta magnitud en un pozo de Si de 10 nm de anchura a una temperatura de 300 K.

La Figura 4.13 muestra las tasas de *scattering* con fonones ópticos para los huecos en las subbandas H0 y H2. En ambos casos se observa un desplazamiento de las curvas hacia la derecha como consecuencia del mayor confinamiento, que provoca un incremento en las energías de los estados. De esta manera, los fondos de las subbandas se encuentran a energías más altas, y por consiguiente los escalones de las curvas se mueven hacia energías mayores. Este desplazamiento es casi exacto para la subbanda H2, mientras que en la subbanda H0 viene acompañado de un pequeño incremento en las tasas de *scattering*. Éste podría deberse a un aumento de los valores de las integrales de solapamiento de la ecuación (4.39) cuando se aumenta el campo eléctrico, ya que éstas toman valores más altos cuando el confinamiento de los portadores se intensifica. El significado físico de este comportamiento es la posibilidad de un número mayor de fonones que produzcan las transiciones, ya que al disminuir la indeterminación de la posición del portador, aumenta la indeterminación del momento del mismo en la dirección z . Por tanto, ya que el campo eléctrico produce un confinamiento más fuerte en los portadores de la subbanda H0 que en la subbanda H2, el *scattering* con fonones ópticos se hará un poco más intenso en el primer caso.

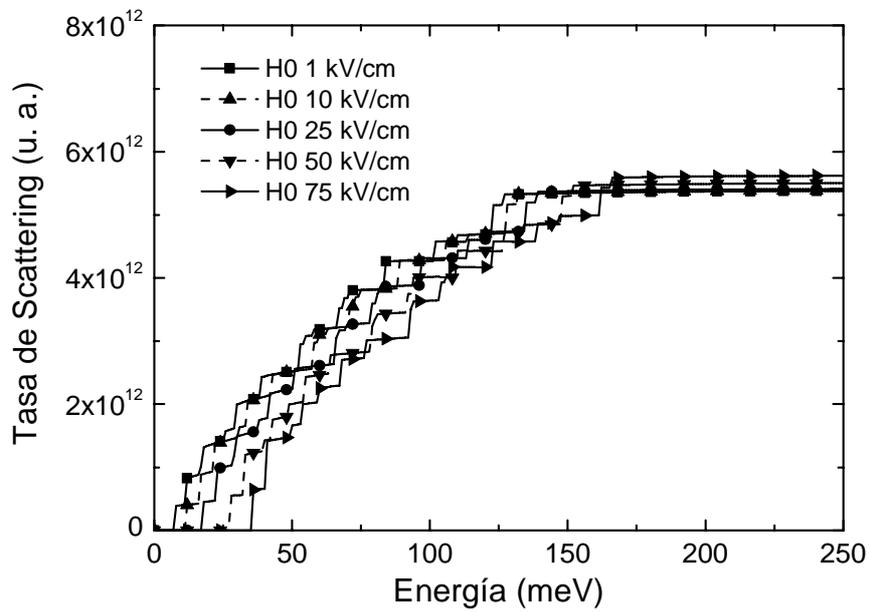


(a)

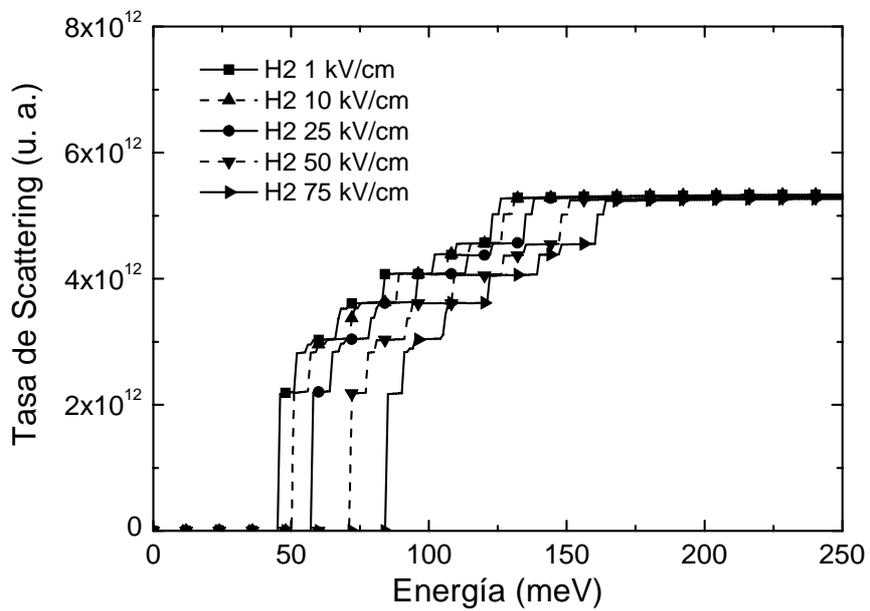


(b)

Figura 4.13: Tasas totales de *scattering* con fonones ópticos en una lámina de Si de 10 nm de espesor a 300 K con un campo eléctrico aplicado comprendido entre 1 kV/cm y 75 kV/cm para las subbandas (a) H0 y (b) H2.



(a)



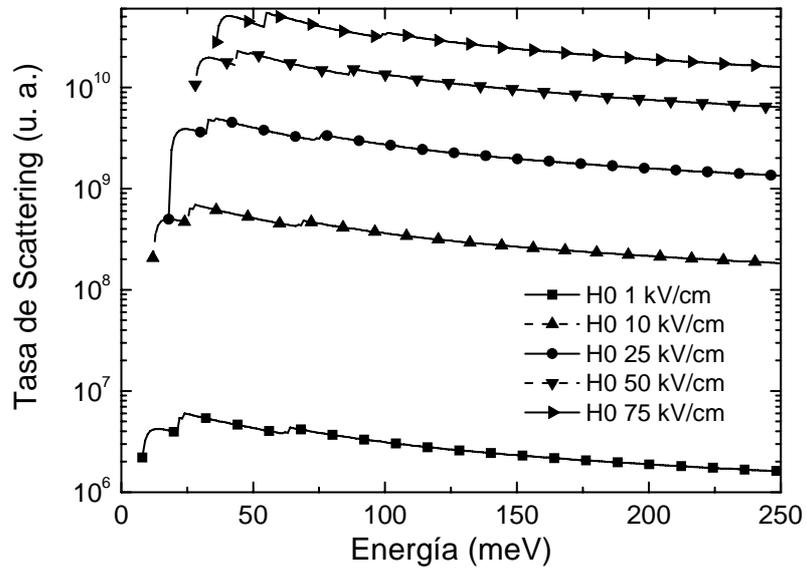
(b)

Figura 4.14: Tasas totales de *scattering* con fonones acústicos en una lámina de Si de 10 nm de espesor a 300 K con un campo eléctrico aplicado comprendido entre 1 kV/cm y 75 kV/cm para las subbandas (a) H0 y (b) H2.

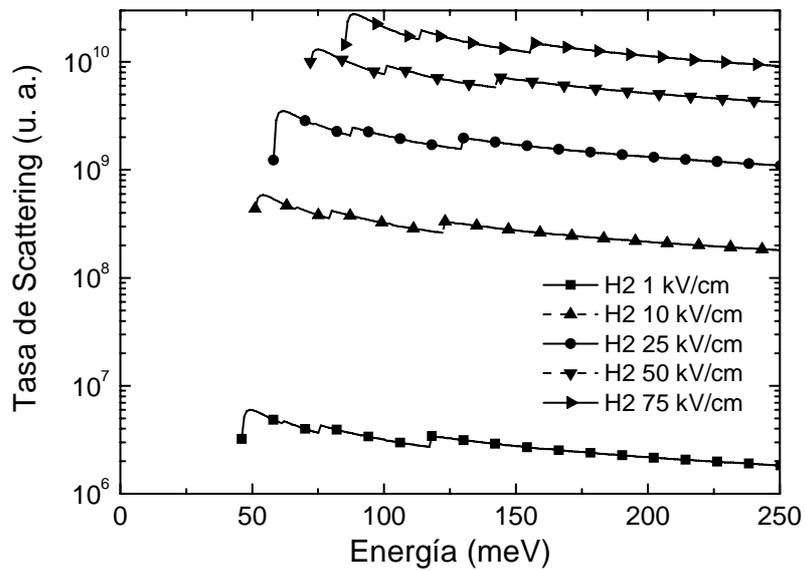
La Figura 4.14 muestra las curvas de las tasas de *scattering* con fonones acústicos en las subbandas H0 y H2. El comportamiento es semejante al de los fonones ópticos por los mismos motivos ya comentados.

En resumen, un campo eléctrico mayor producirá un desplazamiento de las curvas de las tasas de *scattering* hacia energías más altas, junto con un pequeño incremento en los valores de las mismas que será apreciable tan sólo en las subbandas más bajas.

Por otro lado, la Figura 4.15 y la Figura 4.16 muestran los efectos del campo eléctrico en las tasas de *scattering* debido a la rugosidad superficial en las subbandas H0 y H2 tanto de la *interface* del óxido de puerta como de la del óxido enterrado,. La característica que tienen en común todos los casos mostrados es el fuerte incremento en las tasas de *scattering* cuando se aumenta el campo eléctrico aplicado. La justificación de este comportamiento está, precisamente, en que la rugosidad superficial producirá perturbaciones más fuertes en el potencial cuando el campo eléctrico sea más intenso ya que potencial es proporcional al campo en un pozo triangular. No obstante, comparando los valores de las curvas correspondientes a los campos de 1 kV/cm y 75 kV/cm se observa una serie de hechos en ambas figuras. Para la subbanda H0, el incremento del campo entre los valores indicados provoca que las tasas de *scattering* con la rugosidad superficial de la puerta se multipliquen aproximadamente por 10^4 ; en el caso de la rugosidad superficial con el óxido enterrado, las tasas se hacen 2.5×10^3 veces mayores. Respecto a la subbanda H2, el *scattering* con la rugosidad de puerta se hace 5.5×10^3 veces más intenso, mientras que con la rugosidad del óxido enterrado las tasas de *scattering* se multiplican aproximadamente por 8×10^3 . Esto sugiere que un campo eléctrico más intenso aumenta en mayor medida las tasas de *scattering* de la subbanda fundamental correspondientes a la rugosidad con la *interface* de puerta, mientras que las tasas correspondientes a la rugosidad del óxido enterrado se incrementan en mayor medida en las subbandas excitadas. La mayor importancia relativa del *scattering* debido a la rugosidad de la *interface* del óxido enterrado en las subbandas excitadas puede justificarse desde el punto de vista de las funciones de onda que proporciona la ecuación de Schrödinger.

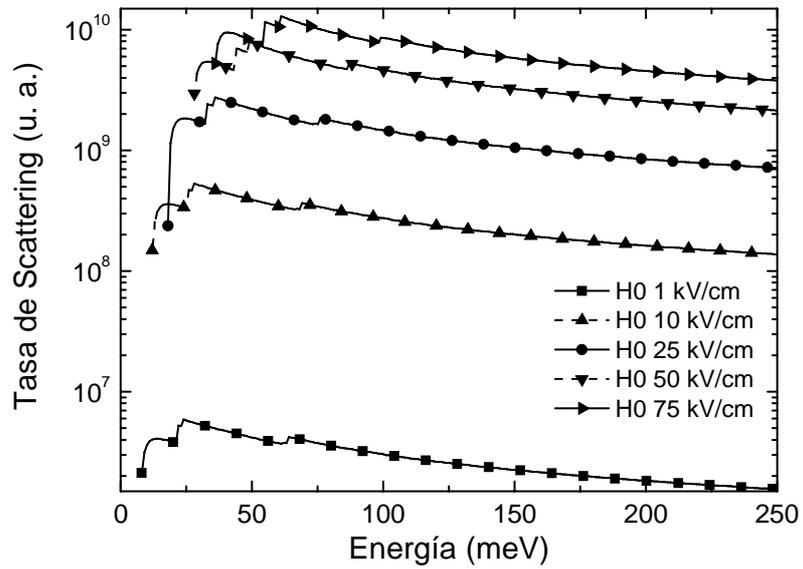


(a)

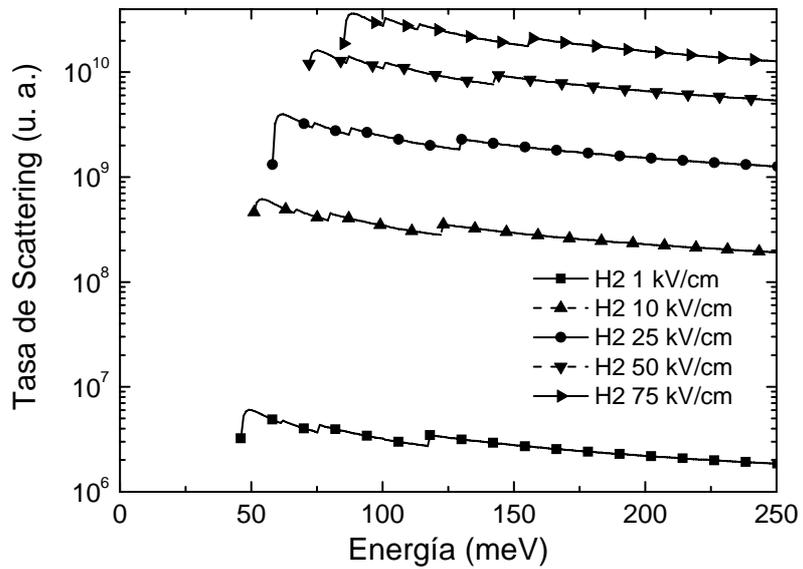


(b)

Figura 4.15: Tasas totales de *scattering* debido a la rugosidad superficial de la *interface* del óxido de puerta en una lámina de Si de 10 nm de espesor a 300 K con un campo eléctrico aplicado comprendido entre 1 kV/cm y 75 kV/cm para las subbandas (a) H0 y (b) H2.



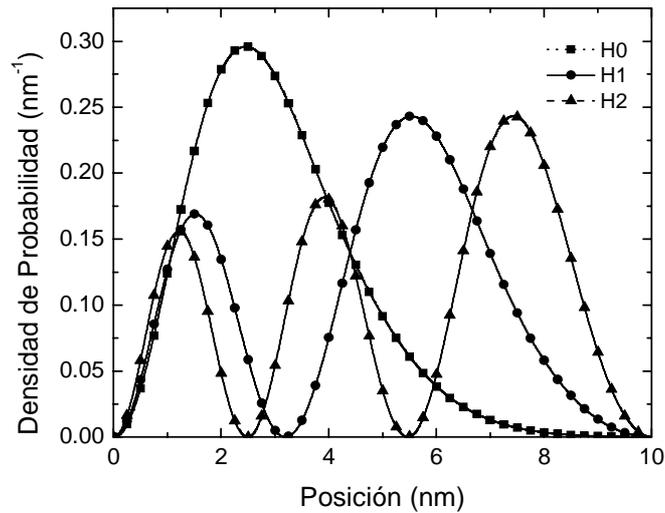
(a)



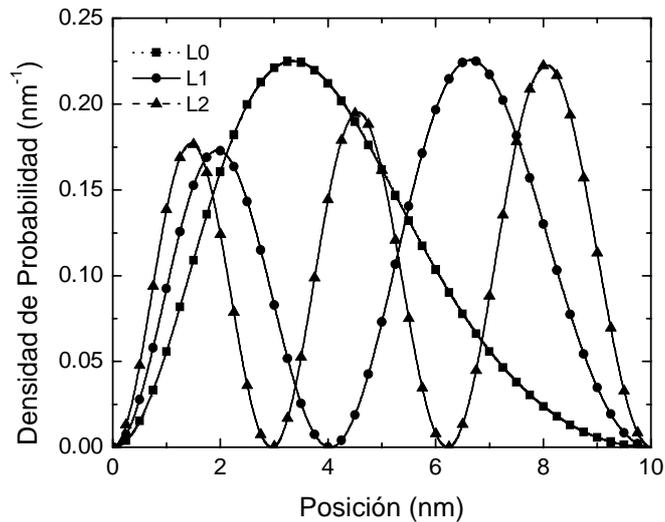
(b)

Figura 4.16: Tasas totales de *scattering* debido a la rugosidad superficial de la *interface* del óxido enterrado en una lámina de Si de 10 nm de espesor a 300 K con un campo eléctrico aplicado comprendido entre 1 kV/cm y 75 kV/cm para las subbandas (a) H0 y (b) H2.

Para justificar lo expuesto, la Figura 4.17 muestra la densidad de probabilidad en la dirección de confinamiento de los estados en las subbandas H0, H1 y H2 cuando se aplica un campo eléctrico de 75 kV/cm. Se puede observar que las funciones envolventes de las dos primeras subbandas se encuentran desplazadas hacia la *interface* de puerta, mientras



(a)



(b)

Figura 4.17: Densidades de probabilidad correspondientes a las funciones envolventes de las subbandas (a) H0, H1 y H2 y (b) L0, L1 y L2 de una lámina de Si de 10 nm de espesor con un campo eléctrico aplicado de 75 kV/cm.

que la subbanda H2 se encuentra desplazada hacia la otra *interface*. Esta apreciación cualitativa puede corroborarse cuantitativamente calculando el valor esperado de la posición según las funciones de densidad de probabilidad. Este valor, en el caso del portador en la subbanda H0, es de 3 nm, lo que indica que el hueco se hallará más próximo a la *interface* del óxido de puerta. En la subbanda H1, el valor esperado es de 4.7 nm, mientras que para la subbanda H2 éste es 5.35 nm, por lo que el portador se encontrará más próximo a la *interface* del óxido enterrado que a la de puerta. Se ha observado que el valor esperado de la posición en subbandas por encima de las citadas es un poco mayor, por lo que el hueco estará aún más alejado de la puerta. El estudio de las funciones envolventes de las subbandas L0, L1 y L2 lleva a conclusiones similares. Así pues, esto parece indicar que, en efecto, la rugosidad de la *interface* del óxido enterrado tiene mayor relevancia para las subbandas más altas, mientras que la rugosidad de puerta será muy importante en las subbandas más bajas.

Resumiendo las observaciones que se han realizado en este apartado, el estudio de las tasas de *scattering* de los mecanismos estudiados parece indicar que el transporte de huecos en estructuras de tipo SOI presentará una reducción en su movilidad cuando se aplique un campo eléctrico más intenso, principalmente como consecuencia del extraordinario aumento de las tasas de *scattering* debido a la rugosidad superficial.

4.5.3 Efecto de la anchura de la lámina de Si

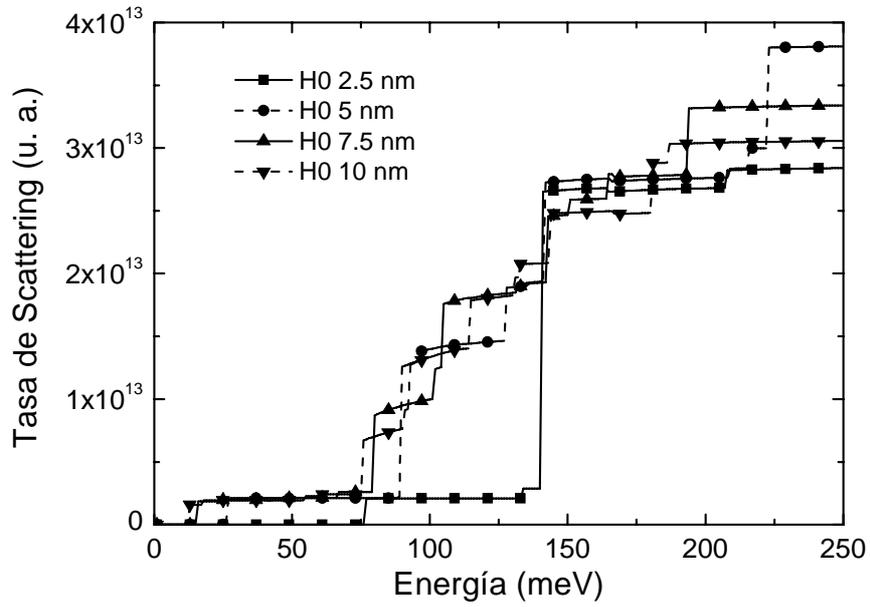
En este apartado se analizará la influencia que tiene la anchura de la lámina de Si en las tasas de *scattering*. Para ello se realizarán los cálculos en un pozo de espesor variable entre 2.5 nm y 10 nm, a una temperatura de 300 K y con un campo eléctrico aplicado de 10 kV/cm. El rango de anchuras que se ha estudiado puede ser descrito adecuadamente con el conjunto de subbandas 531, como ya se justificó en la sección 4.3.

En primer lugar, la Figura 4.18 y la Figura 4.19 muestran las tasas de *scattering* con fonones ópticos y acústicos para portadores en las subbandas H0 y H2 para tres anchuras distintas de la lámina de Si. Observando los resultados es difícil determinar una tendencia

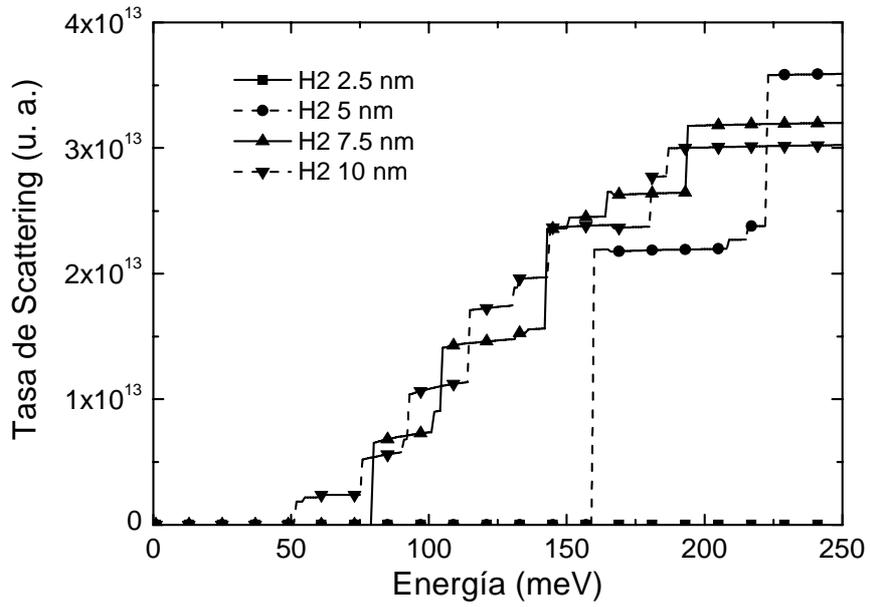
en las tasas de *scattering* cuando se varía el espesor de la lámina de Si. De hecho, las tasas observadas están influidas por dos efectos que se contrarrestan. En primer lugar, un pozo más estrecho confinará más a los portadores, y como consecuencia aumentará el valor de las tasas de *scattering* al existir un mayor número de fonones disponibles para realizar las transiciones [Gámiz, 1999b]. Esto está relacionado con el escalonado mucho más abrupto de las tasas de *scattering* en los pozos más estrechos. En segundo lugar, una lámina más estrecha tendrá subbandas más separadas entre sí, y por consiguiente deberá incrementarse notablemente la energía del portador para poder alcanzar el siguiente escalón. En definitiva, los grandes saltos de las tasas de *scattering* con fonones que se observan cuando la lámina reduce su espesor se compensan con el mayor espaciado de energías que hay entre los escalones de las curvas.

En los casos mostrados en estas figuras se aprecia que las tasas de *scattering* suelen ser bastante menores en una lámina más estrecha, si bien es cierto que el escalonado hace que éstas se incrementen en gran medida, superando con frecuencia las tasas de *scattering* de los pozos más anchos.

Un aspecto interesante que se puede destacar de las tasas de *scattering* representadas es que, cuanto más estrecho es el pozo, las tasas de *scattering* se mantienen más constantes en los intervalos de energía que median entre los saltos. Este hecho está vinculado con una no parabolicidad menos importante en cada una de las subbandas de la estructura en los pozos de menor espesor. Con respecto a esta observación, es conveniente no confundir la no parabolicidad de la banda de valencia con la no parabolicidad de cada una de las subbandas obtenidas al resolver la ecuación de Shrödinger de masa efectiva. Mientras que la no parabolicidad puede ser despreciable dentro de una subbanda por la forma que tenga la relación $E_n(k_{\parallel})$, el cálculo de la misma no se puede realizar con fiabilidad si no se incluyen los efectos de no parabolicidad de la banda de valencia en el algoritmo.

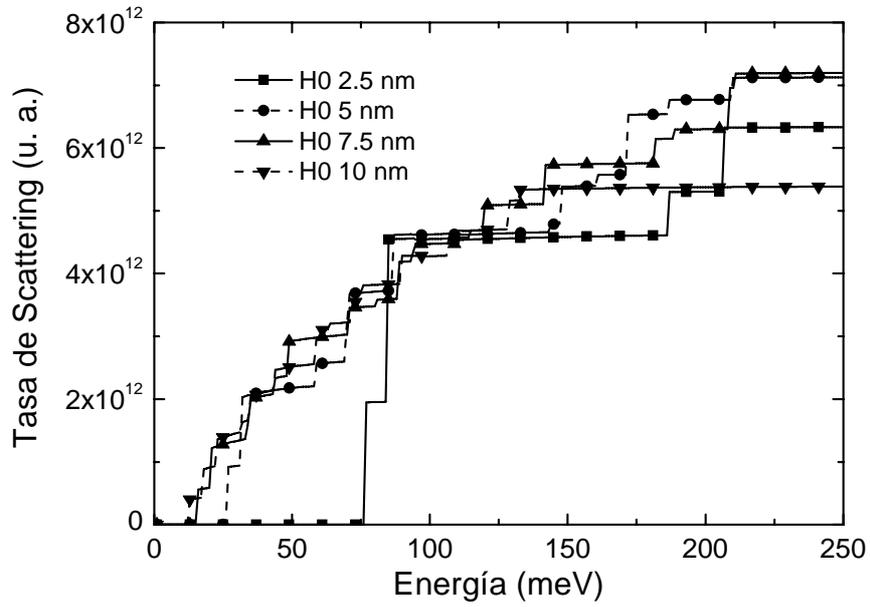


(a)

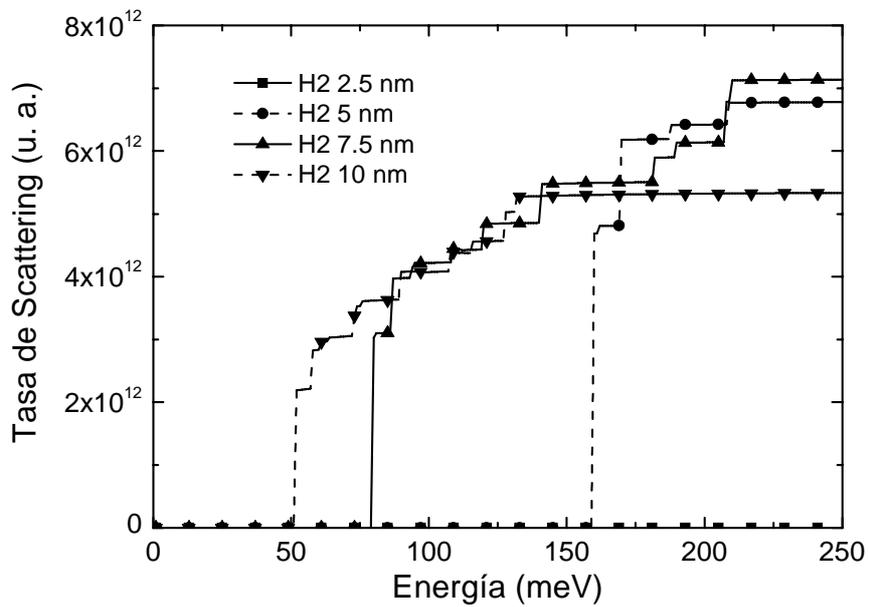


(b)

Figura 4.18: Tasas totales de *scattering* con fonones ópticos en láminas de Si de espesores comprendidos entre 2.5 y 10 nm a 300 K con un campo eléctrico aplicado de 10 kV/cm para las subbandas (a) H0 y (b) H2.

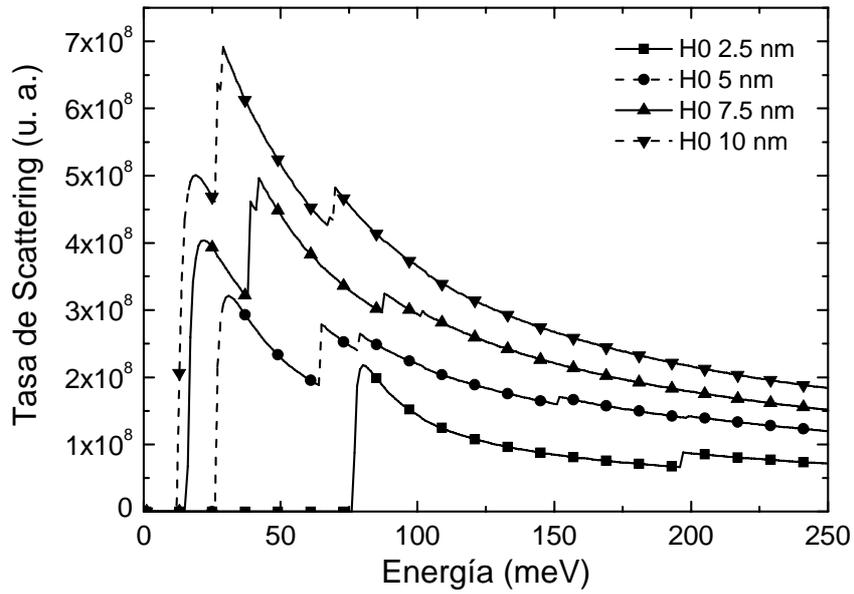


(a)

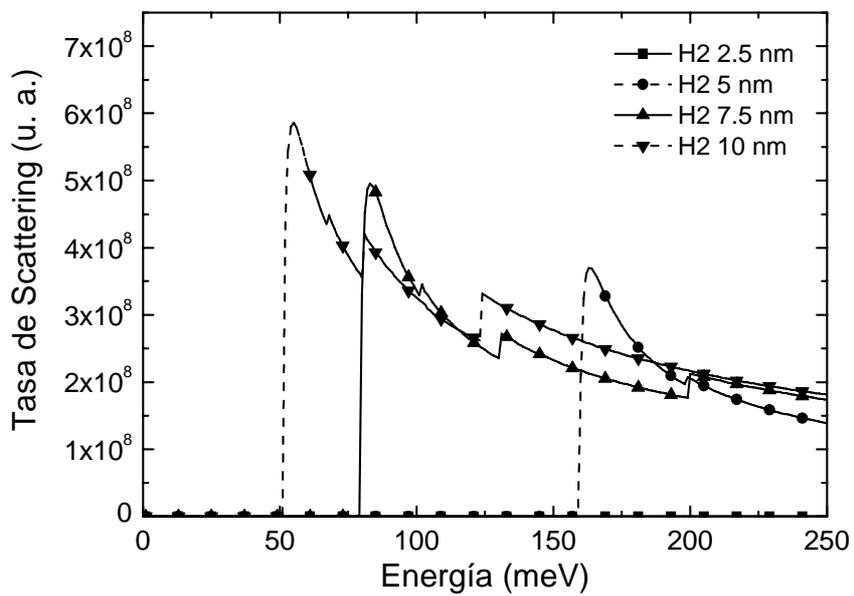


(b)

Figura 4.19: Tasas totales de *scattering* con fonones acústicos en láminas de Si de espesores comprendidos entre 2.5 y 10 nm a 300 K con un campo eléctrico aplicado de 10 kV/cm para las subbandas (a) H0 y (b) H2

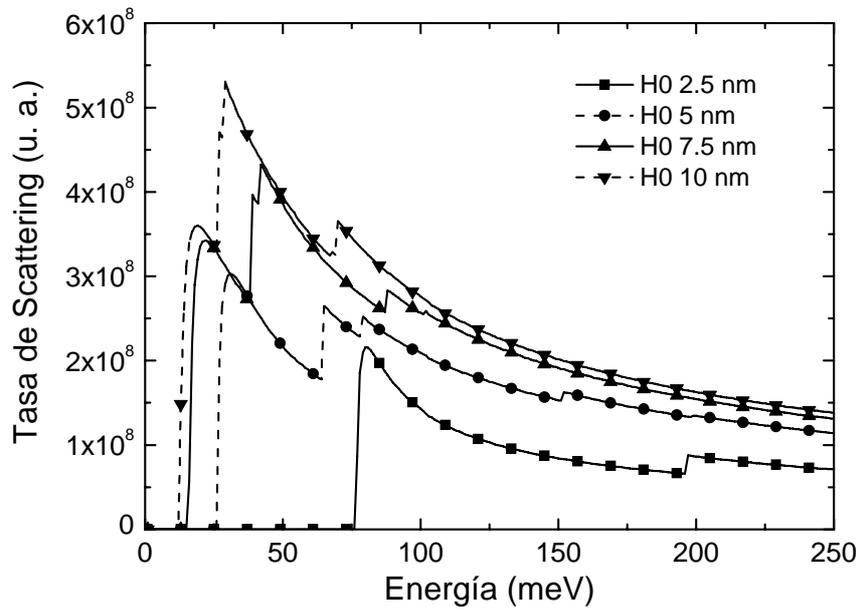


(a)

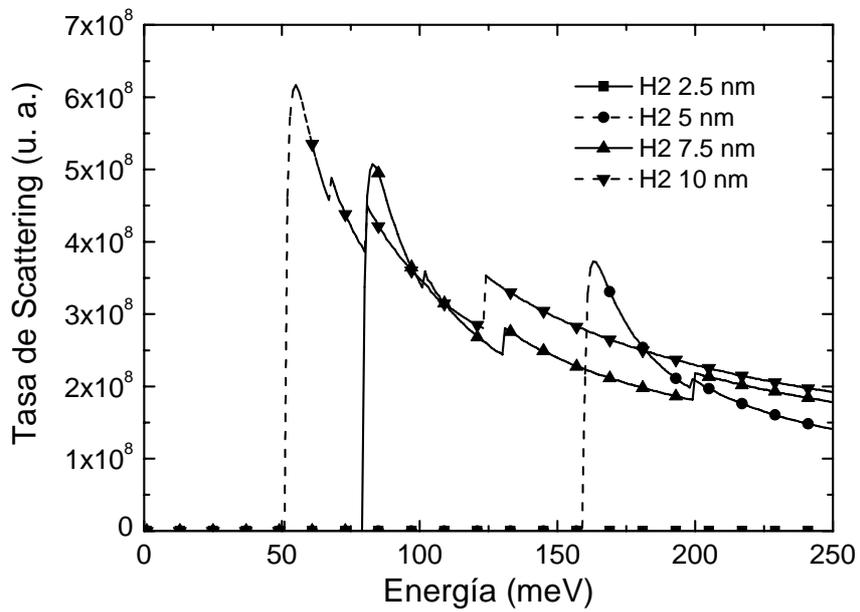


(b)

Figura 4.20: Tasas totales de *scattering* debido a la rugosidad superficial de la *interface* de puerta en láminas de Si de espesores comprendidos entre 2.5 y 10 nm a 300 K con un campo eléctrico aplicado de 10 kV/cm para las subbandas (a) H0 y (b) H2



(a)



(b)

Figura 4.21: Tasas totales de *scattering* debido a la rugosidad superficial de la *interface* del óxido enterrado en láminas de Si de espesores comprendidos entre 2.5 y 10 nm a 300 K con un campo eléctrico aplicado de 10 kV/cm para las subbandas (a) H0 y (b) H2

La Figura 4.20 y Figura 4.21 muestran las tasas totales de *scattering* de las subbandas H0 y H2 con las *interfaces* de puerta y del óxido enterrado para varios espesores del pozo. Se observa que cuanto menor es la anchura de la lámina de Si, menor es la tasa de *scattering*. La justificación de estos resultados es la siguiente: según el modelo que se ha usado en este análisis, el potencial electrostático en la estructura SOI del hamiltoniano sin perturbar es

$$V(z) = E_{zz} z \quad (4.114)$$

siendo E_{zz} el campo eléctrico transversal. Si se perturba la *interface* del óxido de puerta o del óxido enterrado, los potenciales electrostáticos son, respectivamente

$$V_G(z) = \frac{E_{zz} L}{L + \Delta_m} [z + \Delta_m] \quad (4.115)$$

$$V_{BOX}(z) = \frac{E_{zz} L}{L + \Delta_m} [z]$$

y por consiguiente, según la ecuación (4.90), la perturbación del potencial es

$$\Delta V_G(z) = \frac{E_{zz} \Delta_m}{L + \Delta_m} [L - z] \quad ; \quad 0 \leq z \leq L \quad (4.116)$$

$$\Delta V_{BOX}(z) = \frac{E_{zz} \Delta_m}{L + \Delta_m} [-z] \quad ; \quad 0 \leq z \leq L$$

Estas expresiones se usan en la evaluación de las integrales $\int_L^* \Delta V_m(z) \Delta V_i(z) dz$ que aparecen en el desarrollo de las tasas de *scattering*. Se puede observar que el valor absoluto de las mismas en ambos casos es aproximadamente

$$\left| \int_L^* \Delta V_m(z) \Delta V_i(z) dz \right| \approx \frac{E_{zz} \Delta_m L}{L + \Delta_m} \frac{L}{2} \quad (4.117)$$

Puesto que en el estudio realizado se ha mantenido constante el campo eléctrico y el valor de Δ_m , una reducción de la anchura L implica la disminución de las tasas de *scattering* debido a la rugosidad superficial de ambas *interfaces*.

También se puede destacar de las figuras el desplazamiento de las curvas hacia energías más altas como consecuencia del desplazamiento del fondo de las subbandas al aumentar la energía. Este hecho es extremo en la posición del fondo de la subbanda H2 en el pozo de

2.5 nm, que tiene una energía mayor que la máxima representada, lo que causa que las tasas de *scattering* sean cero en todo el rango. A pesar de este hecho se ha preferido esta representación en vez de extender el rango de energías con el propósito de poder comparar con facilidad estas tasas con las de otras figuras.

4.5.4 Efecto de la rugosidad de la interface Si-SiO₂

Las tasas de *scattering* debido a la rugosidad superficial con la *interface* de puerta y de óxido son función de los parámetros Δ_m y L_{corr} que describen la *interface* Si-SiO₂. La variación de los mismos da lugar a tasas de *scattering* diferentes, y su implicación en el transporte puede inferirse de forma aproximada del estudio de cómo afectan estos a los valores de las tasas de *scattering*.

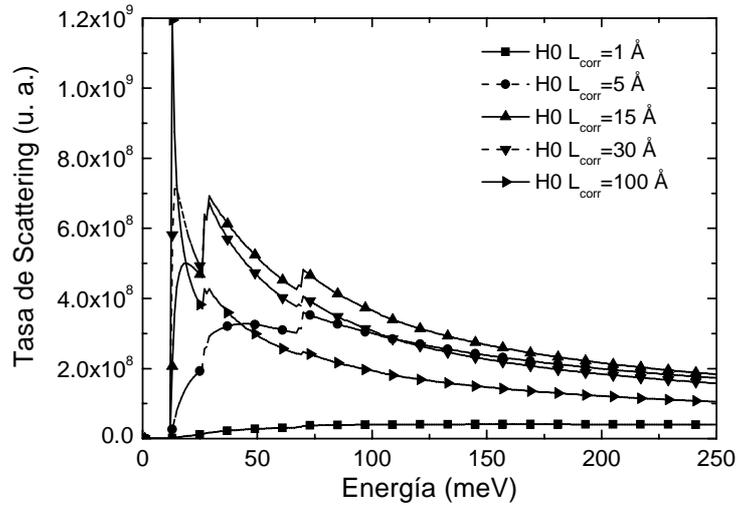
Siguiendo el modelo de estructura SOI usado en este trabajo se puede estimar analíticamente la forma en que cambian las tasas de *scattering* cuando se varía el valor cuadrático medio de la rugosidad superficial Δ_m . La ecuación (4.116) muestra las perturbaciones del potencial electrostático en un pozo triangular de anchura L que desplace una de sus *interfaces* una distancia Δ_m manteniendo la otra fija. Cuando se introducen las correspondientes perturbaciones en las tasas de *scattering* de la ecuación (4.113) es posible

extraer como valor constante el factor $\left[\frac{E\Delta_m}{L + \Delta_m} \right]^2$, teniéndose que las tasas de *scattering*

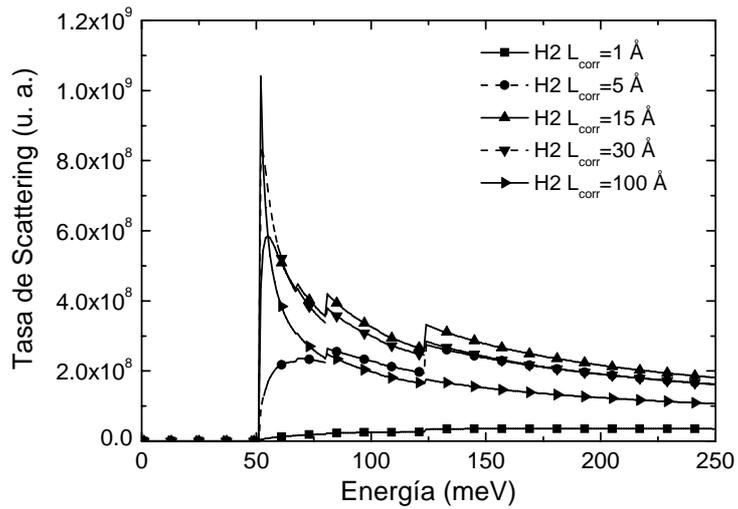
serán proporcionales al mismo, de modo que un estudio de la influencia del valor cuadrático medio de la rugosidad superficial es especialmente sencillo. Para pequeñas perturbaciones ($\frac{\Delta_m}{L} \ll 1$) se puede afirmar que las tasas de *scattering* verifican la siguiente

relación

$$P^{RS} \propto \left[\frac{\Delta_m}{L + \Delta_m} \right]^2 \approx \left[\frac{\Delta_m}{L} \right]^2 \quad (4.118)$$



(a)



(b)

Figura 4.22: Tasas totales de *scattering* debido a la rugosidad superficial de la *interface* de puerta en láminas de Si de 10 nm de espesor con un campo eléctrico aplicado de 10 kV/cm a 300 K y longitudes de correlación variables entre 1 Å y 100 Å para las subbandas (a) H0 y (b) H2

Por consiguiente un aumento en Δ_m provocará un aumento de las tasas de *scattering* proporcional al cuadrado de este parámetro.

Respecto a la longitud de correlación, las tasas de *scattering* van multiplicadas por L_{corr}^2 , y además este parámetro aparece en el interior de la integral angular de la ecuación (4.113), lo que hace más difícil estimar analíticamente las implicaciones de esta magnitud en las

mismas. Por este motivo, se calcularon las tasas de *scattering* para varios valores de la longitud de correlación próximos a los típicos para determinar su influencia. Como ejemplo, la Figura 4.22 muestra las tasas de *scattering* debido a la rugosidad de puerta en las subbandas H0 y H2 para longitudes de correlación de 1 Å, 5 Å, 15 Å, 30 Å y 100 Å. Los efectos que se observen serán semejantes a los que se produzcan en las tasas de *scattering* correspondientes al óxido enterrado, ya que dicho parámetro influye en las tasas de *scattering* de ambos de la misma manera. Los resultados obtenidos sugieren que, cuanto menor es el valor de este parámetro, menor importancia tiene la rugosidad superficial. Conforme aumenta la longitud de correlación van aumentando las tasas de *scattering* de manera uniforme. No obstante, se observa que cuando la longitud de correlación es de 30 Å y 100 Å el aumento se concentra en la región de bajas energías, pudiendo observarse un pico muy agudo que decrece fuertemente hasta valores por debajo de curvas de longitud de correlación menor. Por consiguiente, los resultados parecen indicar que cuanto mayor es el valor de la longitud de correlación, mucho más intensa es la influencia de la rugosidad superficial en el transporte en las cercanías de los fondos de las subbandas. La justificación de este comportamiento podría estar en que cuanto menor es la longitud de correlación, menor es la aleatoriedad del ruido de la rugosidad superficial. Por tanto el portador se mueve experimentando cambios más uniformes en el potencial electrostático, y como consecuencia la perturbación introducida por la rugosidad superficial en el hamiltoniano del problema será menos importante.

4.5.5 Efecto de la dirección de confinamiento

Por último se lleva a cabo un estudio de las tasas de *scattering* de cada uno de los mecanismos tratados en este trabajo cuando la dirección de confinamiento se orienta según las direcciones cristalinas $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ y $\langle 111 \rangle$. En primer lugar resolvimos la ecuación de Schrödinger de masa efectiva siguiendo el procedimiento indicado en la sección 3.7, y seguidamente se usaron los resultados obtenidos de relaciones $E_n(k_{\parallel})$ y funciones envolventes en el cálculo de las tasas de *scattering*.

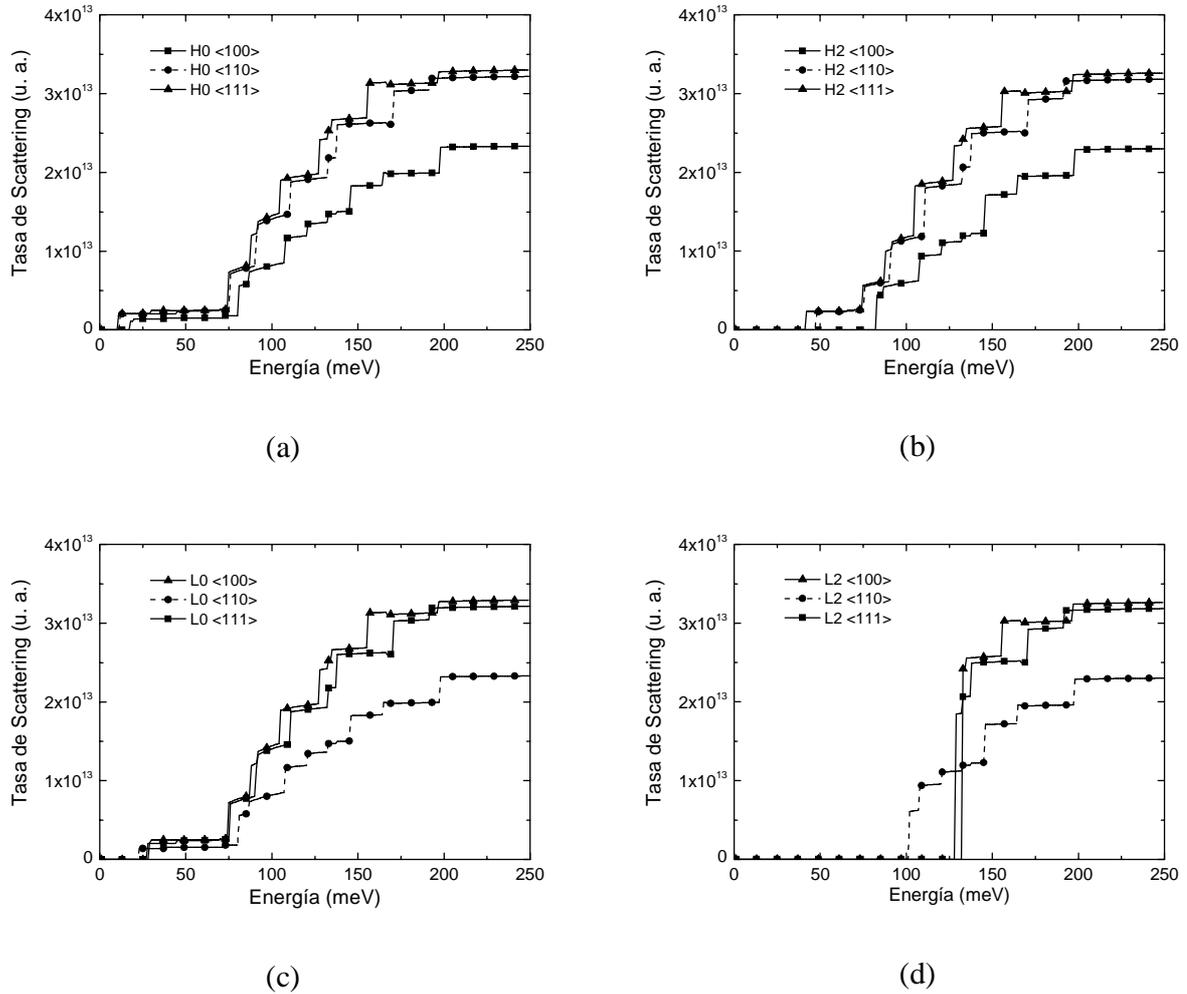


Figura 4.23: Tasas totales de *scattering* con fonones ópticos en una lámina de Si de 10 nm de espesor con un campo eléctrico aplicado de 10 kV/cm a 300 K para las subbandas (a) H0, (b) H2, (c) L0 y (d) L2 cuando la dirección de confinamiento se orienta según las direcciones $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ y $\langle 111 \rangle$.

La Figura 4.23 muestra las tasas de *scattering* con fonones ópticos de las subbandas H0, H2, L0 y L2 de una estructura SOI de 10 nm de espesor y 10 kV/cm de campo eléctrico aplicado operando a 300 K de temperatura. Puesto que la anisotropía influye de manera diferente en los huecos pesados y ligeros, en esta sección se ha estudiado también el comportamiento de las tasas de *scattering* en estos últimos.

Las curvas mostradas para las subbandas H0 y H2 indican que las tasas de *scattering* son menores cuando el confinamiento de los portadores se realiza en la dirección $\langle 100 \rangle$, ya que la densidad de estados en el plano paralelo a la *interface* es menor. Cuando el confinamiento es en las direcciones $\langle 110 \rangle$ ó $\langle 111 \rangle$ las tasas de *scattering* toman valores

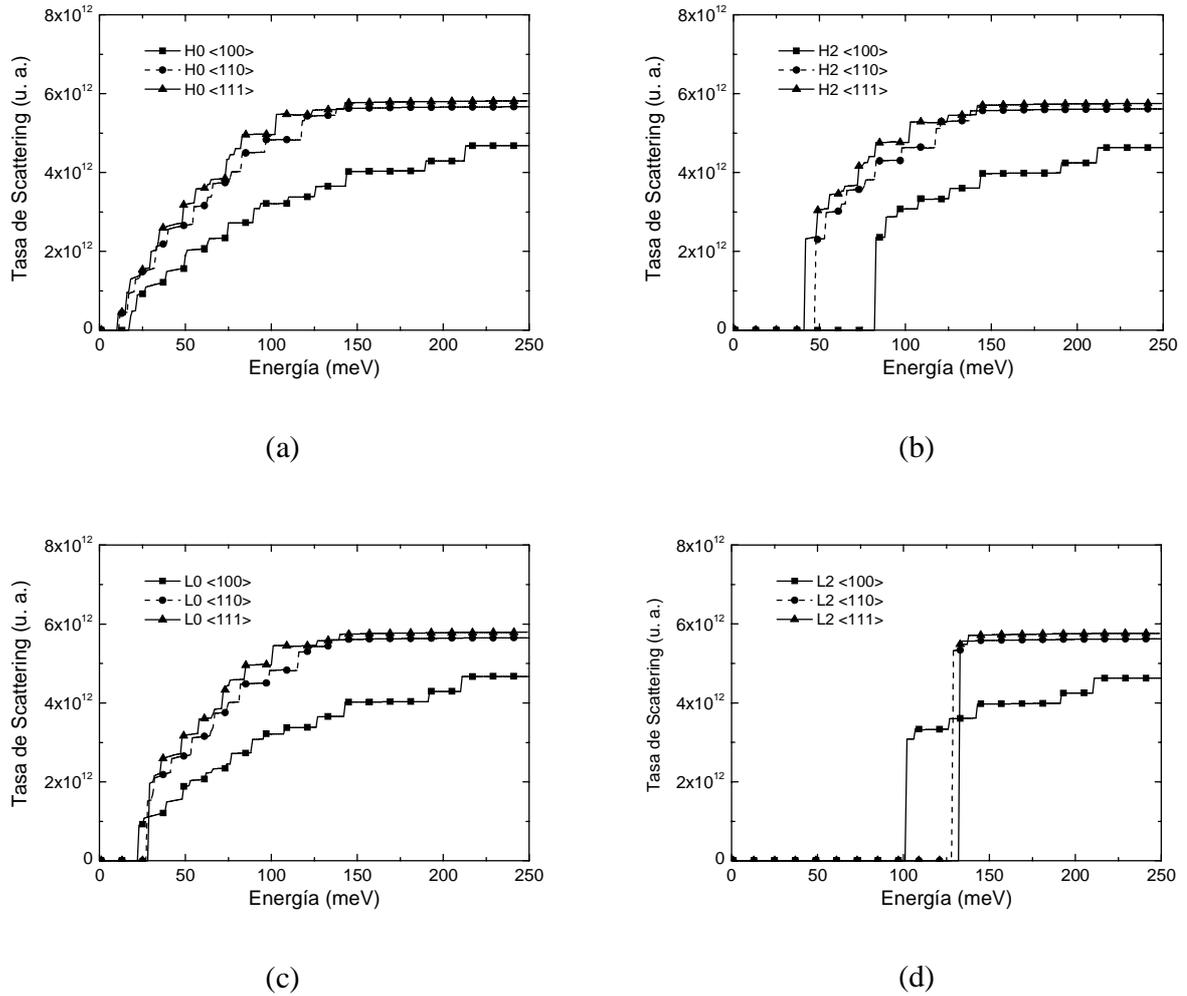


Figura 4.24: Tasas totales de *scattering* con fonones acústicos en una lámina de Si de 10 nm de espesor con un campo eléctrico aplicado de 10 kV/cm a 300 K para las subbandas (a) H0, (b) H2, (c) L0 y (d) L2 cuando la dirección de confinamiento se orienta según las direcciones $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ y $\langle 111 \rangle$.

próximos, si bien es cierto que se encuentran tasas un poco más altas cuando el confinamiento es en la dirección $\langle 111 \rangle$.

Las curvas referentes a las subbandas L0 y L2 muestran comportamientos diferentes de los anteriores. En estos casos, las tasas de *scattering* menores se encuentran cuando la dirección de confinamiento es la $\langle 110 \rangle$, mientras que las tasas más altas se dan en el caso en que dicha dirección es la $\langle 100 \rangle$.

En la Figura 4.24 se observan resultados similares en las tasas de *scattering* con fonones acústicos de las subbandas H0 y H2. Los cambios de los valores de las tasas al cambiar la dirección de confinamiento son del mismo tipo en estas curvas. Sin embargo, los datos

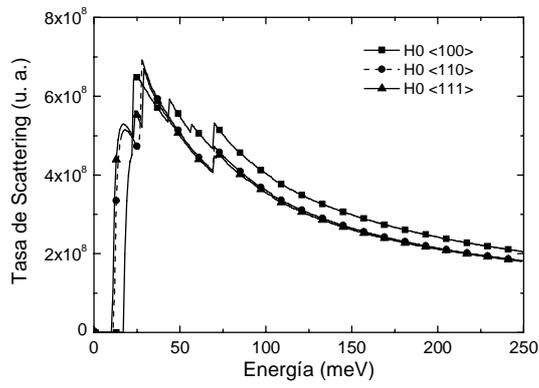
correspondientes a las subbandas L0 y L2 muestran una tendencia diferente de la observada en el estudio de los fonones ópticos. En este caso, la dirección de confinamiento en la que las tasas de *scattering* es menor es la $\langle 100 \rangle$, mientras que la $\langle 111 \rangle$ muestra los valores más altos.

Por consiguiente, el estudio realizado muestra que el cambio en la dirección de confinamiento es un factor que es capaz de alterar muy significativamente los valores de las tasas de *scattering* de fonones. Además, estas modificaciones pueden ser de distinto tipo en las subbandas de huecos pesados y de ligeros, e incluso las tasas de *scattering* con fonones ópticos y acústicos pueden tener tendencias diferentes. Por ello, en el análisis de las tasas de *scattering* que se ha realizado, aunque se muestran las características más importantes de cada uno de los mecanismos considerados, no permite establecer conclusiones claras acerca de cuál sería la dirección de confinamiento óptima para diseñar dispositivos basados en la tecnología SOI cuyos portadores mayoritarios fuesen los huecos. Para este fin sería necesario implementar la simulación del transporte en la estructura, un tema que se podría abordar en trabajos futuros.

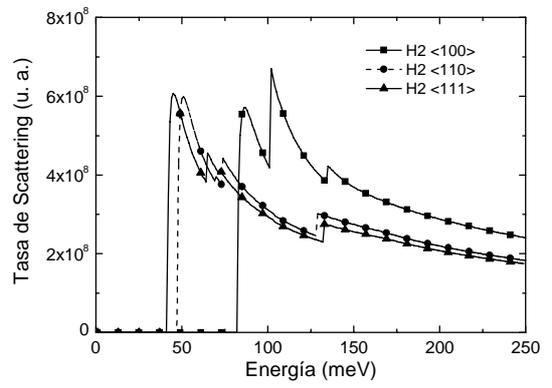
Por lo que respecta a las tasas de *scattering* debido a la rugosidad superficial de puerta y óxido enterrado, la Figura 4.25 y la Figura 4.26 muestran cómo cambian éstas en las subbandas H0, H2, L0 y L2 al cambiar la dirección de confinamiento. En las figuras se puede observar un comportamiento similar en las tasas de *scattering* de puerta y de óxido enterrado, siendo las curvas casi idénticas en algunos casos. En cada caso las variaciones de las tasas de *scattering* más importantes se encuentran en las subbandas excitadas, mientras que en las subbandas H0 y L0 las tasas de *scattering* sufren pequeñas modificaciones cuando se altera la dirección de confinamiento.

Especialmente importantes son los picos que aparecen en las subbandas L2 cuando la dirección de confinamiento es la $\langle 100 \rangle$, que duplican los valores de las tasas en otras direcciones.

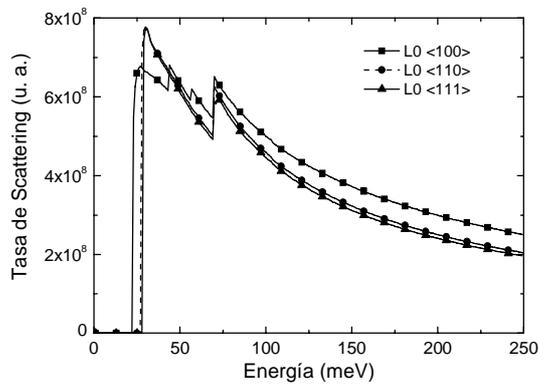
En general se puede apreciar que la dirección de confinamiento $\langle 100 \rangle$ es con frecuencia la que tiene una tasa de *scattering* mayor en todos los casos analizados. Así, los datos sugieren que esta dirección de confinamiento sería la menos favorable en la implementación práctica de los dispositivos cuando la rugosidad superficial sea un mecanismo de *scattering* importante.



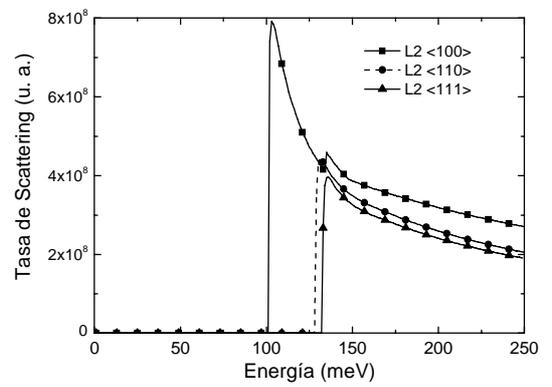
(a)



(b)

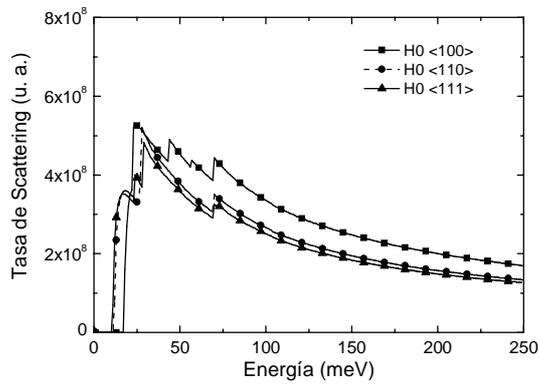


(c)

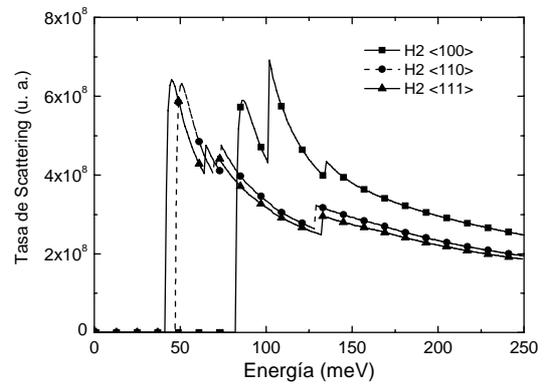


(d)

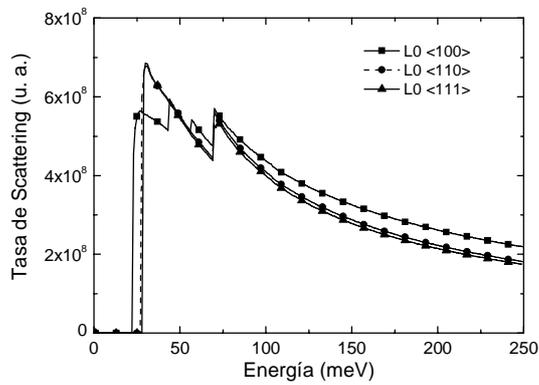
Figura 4.25: Tasas totales de *scattering* debido a la rugosidad superficial de la *interface* de puerta en una lámina de Si de 10 nm de espesor con un campo eléctrico aplicado de 10 kV/cm a 300 K para las subbandas (a) H0, (b) H2, (c) L0 y (d) L2 cuando la dirección de confinamiento se orienta según las direcciones $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ y $\langle 111 \rangle$.



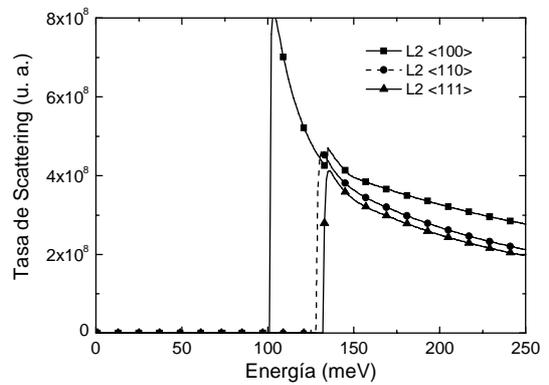
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 4.26: Tasas totales de *scattering* debido a la rugosidad superficial de la *interface* del óxido enterrado en una lámina de Si de 10 nm de espesor con un campo eléctrico aplicado de 10 kV/cm a 300 K para las subbandas (a) H0, (b) H2, (c) L0 y (d) L2 cuando la dirección de confinamiento se orienta según las direcciones $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ y $\langle 111 \rangle$.

Conclusiones

En este trabajo se ha presentado un modelo de banda de valencia de Si y Ge fácilmente generalizable a otros semiconductores que tiene en cuenta la anisotropía, la no parabolicidad y la degeneración de la misma. Éste se obtuvo a partir de la resolución numérica de la ecuación de tercer grado del modelo de Kane, basado en el método k-p. A partir de los resultados obtenidos se realizó un ajuste de los datos usando funciones a trozos. La estructura de tales funciones fue seleccionada de manera que satisficiera una serie de requisitos: i) simplicidad para calcular la energía conocido el vector de onda del portador; ii) ser útil para establecer un ajuste hasta 1 eV y iii) posibilidad de imponer la continuidad en la función a trozos y en su primera derivada. Ésta última condición fue impuesta con el propósito de obtener una función de densidad de estados que no presentase discontinuidades, a diferencia de los resultados previos de otros autores. Además, para que la función de densidad de estados obtenida por medio de la aproximación analítica fuese similar a la que se obtuvo con el modelo numérico, se eligió como parámetro indicador del ajuste la máxima diferencia entre las funciones $\rho(E)$ calculadas con los datos numéricos y las mismas calculadas con las funciones a trozos. Finalmente se comprobó que el modelo numérico y la aproximación analítica proporcionaban resultados análogos tanto en las relaciones $\rho(E)$ como en la densidad de estados.

Con el fin de comprobar la validez del modelo se realizó un estudio en el equilibrio, calculando valores de población relativa de las bandas y energías medias en función de la temperatura. Los resultados obtenidos tanto en Si como en Ge estuvieron en acuerdo con los de otros autores basados en el método del pseudopotencial.

A partir del modelo de banda de valencia presentado evaluamos las tasas de *scattering* de los huecos del cristal con fonones ópticos, acústicos y con impurezas ionizadas. Respecto al *scattering* con fonones acústicos, desarrollamos un método para tener en cuenta adecuadamente la inelasticidad de este mecanismo en el estudio del transporte de huecos, considerando todas las transiciones, tanto intra como interbanda, partiendo del trabajo de otros autores.

En el estudio del *scattering* con impurezas ionizadas se propuso razonadamente una función para llevar a cabo la técnica combinada que permitió considerar la anisotropía angular de la banda de valencia reduciendo notablemente el número de rechazos que se obtenían al implementar la técnica de rechazo.

También se llevó a cabo una comprobación de la validez de las tasas de *scattering* desarrolladas a partir del estudio de los estados de equilibrio proporcionados por las mismas cuando se introducen en un simulador basado en el método Monte Carlo. Se estimaron las poblaciones relativas de las bandas, las funciones de distribución en energías de cada banda y la energía media del gas de huecos y se compararon con los resultados teóricos del modelo de banda de valencia, encontrándose un acuerdo excelente. Con el propósito de comprobar si las tasas de *scattering* con fonones ópticos actuando como único mecanismo de *scattering* satisfacían también el test, a pesar de que este hecho no se puede comprobar directamente debido a la gran energía que se pone en juego en un *scattering* de este tipo, se ideó un método que combinaba los resultados del simulador con la función de distribución en energías teórica de los huecos en equilibrio, y se comprobó que también eran capaces de proporcionar los valores teóricos de energía media en un amplio rango de temperaturas. Para concluir el test se examinaron los resultados que proporcionaba el

simulador en equilibrio para distintos valores de los potenciales de deformación óptico y acústico, observándose que estos parámetros no desempeñan ningún papel en el equilibrio.

Seguidamente se mostraron los resultados obtenidos con los modelos de banda de valencia numérico y analítico. Con el modelo numérico se calculó la velocidad de arrastre frente al campo eléctrico en Si y Ge para varios valores de la temperatura, encontrándose un buen acuerdo con los resultados experimentales. Se calculó también la población relativa de cada una de las bandas y la energía media del gas de huecos en función del campo eléctrico aplicado. Ésta última se comparó con los resultados obtenidos por otros autores que usaron el método del pseudopotencial y se encontró que estaba en consonancia con los mismos. Finalmente se mostraron ejemplos de tiempo de cálculo típico. Con el modelo analítico se realizaron cálculos de velocidad de arrastre frente al campo eléctrico, encontrándose conformidad entre los resultados del modelo numérico y los experimentales. Se indicaron ejemplos de tiempo de cálculo típico, y se observó una importante reducción del mismo cuando se aplicó el modelo analítico. A continuación se realizaron cálculos de movilidades óhmicas en Si y en Ge en un amplio rango de temperaturas y para diversos valores del dopado del cristal y se compararon con los datos experimentales. Para cristales puros se obtuvo un buen acuerdo con los experimentos, mientras que los cristales dopados sólo pudieron ser adecuadamente descritos para bajas concentraciones de impurezas, hasta aproximadamente 10^{16} cm^{-3} .

A continuación se abordó el estudio de las implicaciones de la no parabolicidad de la banda de valencia en el confinamiento de los huecos en una dirección, siendo este trabajo la base para un estudio de más profundidad sobre los dispositivos basados en la tecnología SOI. Con esta intención, se desarrolló la ecuación de Schrödinger de masa efectiva sin imponer restricción alguna sobre la no parabolicidad de la banda. Posteriormente se comprobó que los trabajos de los anteriores autores sobre este tema podían considerarse como casos particulares del formalismo desarrollado en esta investigación.

Para tratar aquellos casos en los que la energía de confinamiento del estado es menor que el potencial en alguna región del espacio (barreras) se propuso el uso de un modelo

parabólico. Esta aproximación es útil cuando se desconoce la relación entre la energía y el momento dentro de la banda prohibida.

Tras el desarrollo teórico, se resolvió la ecuación de Schrödinger de masa efectiva aplicada al caso de las bandas de valencia del Si y del Ge. Se observó la importancia de la consideración de la no parabolicidad en la determinación de las subbandas de energía. Además, se comprobó la bondad de la aproximación parabólica en las barreras comparando los resultados con los obtenidos por el método directo. No obstante, un análisis en más profundidad mostró que las funciones envolventes obtenidas al resolver la ecuación de Schrödinger de masa efectiva usando la aproximación de parabolicidad en las barreras presentaban comportamientos anómalos en las proximidades del fondo de las subbandas. Se llevó a cabo un estudio sobre este aspecto, determinándose finalmente que las funciones envolventes que deberían usarse para toda la subbanda habrían de ser calculadas mediante el método directo en una energía en la que éste sea aplicable. El método expuesto también se extendió para aplicarlo al modelo anisótropo de la banda de valencia, y se estableció una comparación cualitativa entre las subbandas de energía obtenidas y las del método k - p , con el propósito de interpretar adecuadamente los resultados en la implementación del transporte de un gas bidimensional de huecos.

En la última parte de este trabajo se abordaron cuestiones de gran importancia en el estudio de la dinámica de los huecos en una estructura SOI. Se desarrolló el cálculo de la densidad de estados para una banda con cualquier tipo de no parabolicidad. Posteriormente se llevó a cabo un análisis de la población relativa de ciertos conjuntos de subbandas de pequeña energía en una estructura SOI modelada como un pozo triangular de barreras infinitas de 10 nm de espesor. Los resultados sugieren que un conjunto adecuado de subbandas para estudiar la dinámica de los huecos en tales estructuras podría ser el formado por las cinco, tres y primera subbandas de menor energía de huecos pesados, ligeros y *split-off* respectivamente.

Otro aspecto importante para el transporte es el desarrollo de las tasas de *scattering* bidimensionales con fonones ópticos, acústicos y con la rugosidad superficial de la

interface Si-SiO₂ de la puerta y el óxido enterrado. Las tasas correspondientes al *scattering* con los fonones acústicos se obtuvieron de manera similar a las tridimensionales, desarrollando un algoritmo que permite la consideración de la inelasticidad de dicho mecanismo de *scattering*.

Finalmente se dedicó un apartado al análisis de las tasas de *scattering* obtenidas y sus posibles implicaciones en el transporte de huecos. El estudio se basó en una estructura SOI a 300 K con una lámina de Si de 10 nm de espesor y con un campo eléctrico transversal de 10 kV/cm. Inicialmente se analizaron los comportamientos característicos de las tasas de *scattering* con cada uno de los mecanismos en cada una de las subbandas del conjunto 531 en la mencionada estructura. Posteriormente se modificaron los valores de la temperatura, el campo eléctrico transversal, la anchura de la lámina de Si y los parámetros que describen la *interface* Si-SiO₂ y se comentaron los cambios que dichas magnitudes provocaban en las tasas de *scattering* de las subbandas H0 y H2. Se eligieron éstas con el propósito de mostrar cómo influye la forma de la función envolvente del estado del hueco en cada uno de los mecanismos de *scattering*. Por último, se usó el formalismo desarrollado en este trabajo para considerar la anisotropía de la banda de valencia en la ecuación de Schrödinger de masa efectiva con la finalidad de estudiar las tasas de *scattering* de cada uno de los mecanismos cuando el confinamiento de los portadores se realiza en las direcciones cristalinas $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ó $\langle 111 \rangle$.

Apéndice A

Constantes del modelo de banda de valencia de Si y Ge

Valores de las constantes a , b , c y d del mejor ajuste del modelo de banda de valencia desarrollado en este trabajo.

Si

| Intervalo (meV) | a (meV⁻²) | b (meV⁻¹) | c | d (meV⁻¹) |
|----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|----------|-----------------------------|
| 0-8 | $4.979 \cdot 10^{-4}$ | $-7.13 \cdot 10^{-2}$ | 1 | $-6.250 \cdot 10^{-2}$ |
| 8-50 | $4.300 \cdot 10^{-5}$ | $7.025 \cdot 10^{-3}$ | 1.033 | $2.292 \cdot 10^{-2}$ |
| 50-100 | $1.075 \cdot 10^{-6}$ | $4.550 \cdot 10^{-2}$ | 1.241 | $8.124 \cdot 10^{-2}$ |
| 100-1000 | $-8.79 \cdot 10^{-9}$ | $5.110 \cdot 10^{-2}$ | 1.292 | $9.067 \cdot 10^{-2}$ |

Tabla A.1: Banda de huecos pesados de Si

| Intervalo (meV) | a (meV⁻²) | b (meV⁻¹) | c | d (meV⁻¹) |
|------------------------|-----------------------------|-----------------------------|----------|-----------------------------|
| 0-27 | $-7.69 \cdot 10^{-5}$ | $-1.48 \cdot 10^{-3}$ | 1 | $3.522 \cdot 10^{-3}$ |
| 27-50 | $9.977 \cdot 10^{-5}$ | $-1.86 \cdot 10^{-2}$ | 1.059 | $-8.74 \cdot 10^{-3}$ |
| 50-250 | $5.623 \cdot 10^{-4}$ | 4.873 | 135.9 | 11.25 |
| 250-1000 | $1.847 \cdot 10^{-5}$ | 5.145 | 101.9 | 11.25 |

Tabla A.2: Banda de huecos ligeros de Si

| Intervalo (meV) | a (meV ²) | b (meV ⁻¹) | c | d (meV ⁻¹) |
|-----------------|------------------------|------------------------|---------|------------------------|
| 44-54 | -1.64·10 ⁻⁴ | 1.302·10 ⁻² | 0.337 | -9.26·10 ⁻³ |
| 54-100 | -3.93·10 ⁻⁵ | 3.964·10 ⁻² | -0.0696 | 1.370·10 ⁻² |
| 100-200 | -3.82·10 ⁻⁶ | 1.136·10 ⁻¹ | -1.72 | 5.494·10 ⁻² |
| 200-1000 | -2.46·10 ⁻⁸ | 2.383·10 ⁻¹ | -5.03 | 1.176·10 ⁻¹ |

Tabla A.3: Banda de huecos *split-off* de Si

Ge

| Intervalo (meV) | a (meV ²) | b (meV ⁻¹) | c | d (meV ⁻¹) |
|-----------------|------------------------|------------------------|-------|------------------------|
| 0-62 | -1.05·10 ⁻⁴ | 9.116·10 ⁻² | 1 | 9.202·10 ⁻² |
| 62-150 | 4.442·10 ⁻⁶ | -4.54·10 ⁻³ | 1.005 | -3.31·10 ⁻³ |
| 150-300 | 4.269·10 ⁻⁷ | 3.065·10 ⁻³ | 1.079 | 5.584·10 ⁻³ |
| 300-1000 | 1.651·10 ⁻⁹ | 5.840·10 ⁻³ | 1.161 | 9.419·10 ⁻³ |

Tabla A.4: Banda de huecos pesados de Ge

| Intervalo (meV) | a (meV ²) | b (meV ⁻¹) | c | d (meV ⁻¹) |
|-----------------|------------------------|------------------------|--------|------------------------|
| 0-176 | -3.33·10 ⁻⁶ | -2.06·10 ⁻³ | 1 | -7.95·10 ⁻⁴ |
| 176-300 | 8.369·10 ⁻⁶ | -6.15·10 ⁻³ | 1.403 | -3.77·10 ⁻⁴ |
| 300-400 | 4.345·10 ⁻³ | -2.477 | 1332.4 | 9.300 |
| 400-600 | 1.564·10 ⁻⁴ | 7.633·10 ⁻³ | 110.34 | 1.239 |
| 600-1000 | 1.845·10 ⁻⁴ | 1.552 | 554.55 | 11.25 |

Tabla A.5: Banda de huecos ligeros de Ge

| Intervalo (meV) | a (meV²) | b (meV⁻¹) | c | d (meV⁻¹) |
|------------------------|----------------------------|-----------------------------|----------|-----------------------------|
| 295-298 | $-8.24 \cdot 10^{-2}$ | 73.85 | -11295 | 11.25 |
| 298-400 | $-5.65 \cdot 10^{-6}$ | $8.838 \cdot 10^{-3}$ | -0.915 | $6.785 \cdot 10^{-4}$ |
| 400-500 | $-2.30 \cdot 10^{-6}$ | $2.093 \cdot 10^{-2}$ | -2.99 | $6.780 \cdot 10^{-3}$ |
| 500-1000 | $-3.61 \cdot 10^{-7}$ | $5.377 \cdot 10^{-2}$ | -8.88 | $2.080 \cdot 10^{-2}$ |

Tabla A.6: Banda de huecos *split-off* de Ge

Apéndice B

Normalización de la función de onda

Las funciones de onda $\psi(\vec{r}) = \sqrt{\frac{l_{c.u.}}{N_{\parallel}}} u_{n,0}(\vec{r}) e^{i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}} \varphi_n(z)$ han sido usadas en el desarrollo de este trabajo para representar el estado de un portador con vector de onda paralelo \vec{k}_{\parallel} en la subbanda n . Como ya se señaló, las funciones $u_{n,0}(\vec{r})$ son las funciones de Bloch en el fondo de la banda n y $\varphi_n(z)$ son las funciones envolventes en la dirección de confinamiento, obtenidas como funciones propias de la ecuación de Schrödinger de masa efectiva. El propósito de este apéndice es justificar el uso de la constante de normalización $\sqrt{\frac{l_{c.u.}}{N_{\parallel}}}$, siendo $l_{c.u.}$ la longitud de la celda unidad en la dirección de confinamiento y N_{\parallel} el número de celdas unidad contenidas en el plano perpendicular a la dirección de confinamiento.

La constante de normalización será independiente de la orientación del cristal, ya que el determinante jacobiano de una rotación es la unidad. Por consiguiente, una función de onda normalizada en un sistema de coordenadas lo seguirá estando cuando dicho sistema se rote con el mismo valor de la constante de normalización. Por simplicidad se supondrá que la dirección de confinamiento está orientada en la misma dirección que uno de los vectores de la red directa. Además, a las funciones $u_{n,0}(\vec{r})$ y $\varphi_n(z)$ se les impondrán las siguientes condiciones de normalización

$$\int_V u_{n,0}^*(\vec{r}) u_{n,0}(\vec{r}) dV = N \quad (\text{B.1})$$

$$\int_L u_n^*(z) u_n(z) dz = 1 \quad (\text{B.2})$$

siendo V el volumen total del cristal, L la longitud del cristal en la dirección de confinamiento y N el número total de celdas unidad del cristal. La primera de las condiciones se impuso suponiendo implícitamente que la integral de $u_{n,0}^*(\vec{r}) u_{n,0}(\vec{r})$ en una celda unidad es la unidad,

$$\int_{c.u.} u_{n,0}^*(\vec{r}) u_{n,0}(\vec{r}) dV = 1 \quad (\text{B.3})$$

Para comprobar si la constante de normalización que se ha usado es la correcta, se integra el módulo al cuadrado de una función de onda general en todo el cristal

$$\frac{l_{c.u.}}{N_{\parallel} V} \int u_{n,0}^*(\vec{r}) u_{n,0}(\vec{r}) u_n^*(z) u_n(z) dV \quad (\text{B.4})$$

El diferencial de volumen podrá escribirse como

$$dV = d\vec{r}_{\parallel} dz \quad (\text{B.5})$$

donde $d\vec{r}_{\parallel}$ es el diferencial de área en el plano perpendicular a la dirección de confinamiento y dz el diferencial de longitud en la dirección de confinamiento. Por tanto se considera que el recinto de integración V puede descomponerse en el área de integración del plano perpendicular a la dirección de confinamiento, S_{\parallel} , y la extensión del cristal en la dirección de confinamiento previamente definida como L . Llevando a cabo la integración en el plano, y recordando la periodicidad en el mismo de las funciones $u_{n,0}(\vec{r})$, se obtiene el siguiente resultado

$$\int_{S_{\parallel}} u_{n,0}^*(\vec{r}) u_{n,0}(\vec{r}) d\vec{r}_{\parallel} = N_{\parallel} \int_{s_{\parallel, c.u.}} u_{n,0}^*(\vec{r}) u_{n,0}(\vec{r}) d\vec{r}_{\parallel} \quad (\text{B.6})$$

Con esta igualdad se puede limitar el recinto de integración en el plano a la extensión de una única celda unidad. Cuando se integra en el plano, el resultado que se obtiene es una función que sólo depende de la variable z , y por consiguiente se define la función

$$U_{n,0}(z) = \int_{s_{\parallel, c.u.}} u_{n,0}^*(\vec{r}) u_{n,0}(\vec{r}) d\vec{r}_{\parallel} \quad (\text{B.7})$$

Esta función conserva el comportamiento periódico de las funciones $u_{0,n}(\vec{r})$ en la dirección z . Llevando estos resultados a la ecuación (B.4) se tiene

$$\frac{l_{c.u.}}{N_{\parallel}} \int_V u_{n,0}^*(\vec{r}) u_{n,0}(\vec{r}) \psi_n^*(z) \psi_n(z) dV = l_{c.u.} \int_L U_{n,0}(z) \psi_n^*(z) \psi_n(z) dz \quad (B.8)$$

Se efectúa ahora el cambio de variable $z\hat{k} = R_z\hat{k} + r_z\hat{k}$, siendo $R_z\hat{k}$ un vector de la red directa en la dirección de confinamiento y $r_z\hat{k}$ un vector que variarán dentro de la celda unidad. Por la periodicidad de las funciones $U_{n,0}(z)$ y la variación lenta de las funciones $\psi_n(z)$ dentro de una celda unidad, se puede llevara cabo la siguiente aproximación

$$l_{c.u.} \int_L U_{n,0}(z) \psi_n^*(z) \psi_n(z) dz \approx l_{c.u.} \sum_{R_z} \psi_n^*(R_z) \psi_n(R_z) \times \int_{l_{c.u.}} U_{n,0}(z) dz \quad (B.9)$$

El corchete puede aproximarse por la siguiente integral

$$\sum_{R_z} \psi_n^*(R_z) \psi_n(R_z) \approx \frac{1}{l_{c.u.}} \int_L \psi_n^*(z) \psi_n(z) dz \quad (B.10)$$

y según la ecuación (B.3)

$$\int_{l_{c.u.}} U_{n,0}(z) dz = 1 \quad (B.11)$$

Combinando todos los resultados anteriores se puede concluir que el factor de normalización $\sqrt{\frac{l_{c.u.}}{N_{\parallel}}}$ es el adecuado para formular las funciones de onda.

Bibliografía

[**Ando, 1982**] Ando T., Fowler A. B., Stern F., “Electronic properties of two-dimensional systems”, *Reviews of Modern Physics*, vol. 54, pp. 437-672, (1982).

[**Bernholc, 1978**] Bernholc J., Lipari N. O, Pantelides S. T. “Scattering-theoretic method for defects in semiconductors. II. Self-consistent formulation and application to the vacancy in silicon”, *Physical Review B*, vol. 21, pp. 3545-3562, (1978).

[**Brooks, 1951**] Brooks H, “Scattering by ionized impurities in semiconductors”, *Physical Review*, vol. 83, p. 879, (1951)

[**Brown, 1962**] Brown D. M., Bray R. “Analysis of lattice and ionized impurity scattering in p-type germanium”, *Physical Review*, vol. 127, p. 1593, (1962)

[**Bufler, 2001**] Bufler F. M., Schenk A., Fichtner W., “Simplified model for inelastic acoustic phonon scattering of holes in Si and Ge”, *Journal of Applied Physics*, vol. 90, pp. 2626-2628, (2001)

[**Chattopadhyay, 1981**] Chattopadhyay D., Queisser H. J., “Electron scattering by ionized impurities in semiconductors”, *Reviews of Modern Physics*, vol. 53, pp. 745-768, (1981)

[**Conwell, 1950**] Conwell E., V. Weisskopf F., “Theory of impurity scattering in semiconductors”, *Physical Review*, vol. 77, pp. 388-390, (1950)

[**Conwell, 1968**] E. M. Conwell, M. O. Vassell, “High-field transport in *n*-type GaAs”, *Physical Review*, vol. 166, pp. 797-821, (1968)

[**Costato, 1972**] Costato M., Reggiani L., “Nonparabolicity and overlap effects on transport problems in the Froehlich and Paranjape approach”, *Journal of Physics C*, vol. 5, pp. 159-186, (1972)

[**Costato, 1973**] Costato M., Reggiani L., “Scattering Probabilities for Holes. I. Deformation potential and ionized impurity scattering mechanisms”, *Physica Status Solidi*, vol. 58, pp. 471-482, (1973)

[**Crow, 2000**] Crow G. C., Abram R. A., “Monte Carlo simulations of hole transport in SiGe and Ge quantum wells”, *Semiconductor Science and Technology*, vol. 15, pp. 7-14, (2000)

[**Dewey, 1993**] Dewey J., Osman M. A., “Monte Carlo study of hole transport in silicon”, *Journal of Applied Physics*, vol. 74, pp. 3219-3223, (1993)

[**Donetti, 2005**] Donetti L., Gámiz F., Roldán J. B., Godoy A., “Confined acoustic phonons in ultrathin SOI layers”, 15th Workshop on Modelling and Simulation of Electron Devices, Università di Pisa, Pisa, Italia, (2005)

[**Donetti, 2006**] Donetti L., Gámiz F., Rodríguez N., Jimenez F., Sampedro C., “Influence of acoustic phonon confinement on electron mobility in ultrathin silicon on insulator layers”, *Applied Physics Letters*, vol. 88, 122108, (2006)

[**Dorkel, 1981**] Dorkel, J. M., Leturcq Ph., “Carrier mobilities in silicon semi-empirically related to temperature, doping and injection level”, *Solid State Electronics*, vol. 24, pp. 821-825, (1993)

[**Dresselhaus, 1955**] Dresselhaus G., Kip A. F., Kittel C., “Cyclotron resonance of electron and holes in silicon and germanium crystals”, *Physical Review*, 98, pp. 369-384, (1955)

[**Ekenberg, 1989**] Ekenberg U., “Nonparabolicity effects in in a quantum well: sublevel shift, parallel mass, and Landau levels”, *Physical Review B*, vol. 40, pp. 7714-7726 (1989)

[**Erginsoy, 1950**] Erginsoy C. “Neutral impurity scattering in semiconductors”, *Physical Review*, vol. 79, pp. 1013-1014 (1950)

[**Fischer, 2000**] Fischer B., Hofmann K. R., “A full-band Monte Carlo model for the temperature dependence of electron and hole transport in silicon”, *Applied Physics Letters*, vol. 76, pp. 583-585 (2000)

[Fischetti, 1993] Fischetti M. V., Laux S. E., “Monte Carlo study of electron transport in silicon inversion layers”, *Physical Review B*, vol. 48, pp. 2244-2274, (1993)

[Foreman, 1998] Foreman B. A., “Connection rules versus differential equations for envelope functions in abrupt heterostructures”, *Physical Review Letters*, vol. 80, pp. 3823-3826 (1998)

[Gagliani, 1975] Gagliani G., Reggiani L., “Nonparabolicity and intrinsic carrier concentration in Si and Ge”, *Nuovo Cimento*, vol. 30, pp. 207-216 (1975)

[Gámiz, 1994] Gámiz F., “Estudio de las propiedades de transporte de electrones en láminas de inversión semiconductoras por el método de Monte Carlo”, Tesis doctoral, Universidad de Granada, sin publicar (1994)

[Gámiz, 1998] Gámiz F., López-Villanueva J. A., Rodán J. B., Carceller J. E. Cartujo P. “Monte Carlo simulation of electron transport properties in extremely thin SOI-MOSFET’s”, *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 45, pp. 1122-1126 (1998)

[Gámiz, 1999a] Gámiz F., Roldán J. B., López-Villanueva J. A., Cartujo-Cassinello P., Carceller J. E., “Surface roughness at the Si-SiO₂ interfaces in fully depleted silicon-on-insulator inversion layers”, *Journal of Applied Physics*, vol. 86, pp. 6854-6863 (1999)

[Gámiz, 1999b] Gámiz F., Roldán J. B., Cartujo-Cassinello P., Carceller J. E., López-Villanueva J. A., Rodríguez S., “Electron mobility in extremely thin single-gate silicon-on-insulator inversion layers”, *Journal of Applied Physics*, vol. 86, pp. 6269-6275 (1999)

[Gómez-Campos, 2004a] Gómez-Campos F. M., Rodríguez-Bolívar S., Carceller J. E., “An improved Monte Carlo algorithm for ionized impurity scattering in bands with warping, non-parabolicity and degeneracy”, *International Workshop on Computational Electronics IWCE-10*, Purdue University, West Lafayette, Indiana, EEUU, (2004)

[Gómez-Campos, 2004b] Gómez-Campos F.M., Rodríguez-Bolívar S., Carceller J. E., “An efficient Monte Carlo procedure for studying hole transport in doped semiconductors”, *Journal of Computational Electronics*, vol. 3, pp. 329-332, (2004)

[Gómez-Campos, 2005a] Gómez-Campos F. M., Rodríguez-Bolívar S., J. E. Carceller, “Analysis and selection of 2-D and bulk-like states in p-type FD/SOI devices”, *EuroSOI 2005*, Granada, (2005)

[Gómez-Campos, 2005b] Gómez-Campos F. M., Rodríguez-Bolívar S., Jiménez-Tejada J. A., J. E. Carceller, “A qualitative study of the influence of confinement direction on

phonon and interface phonon roughness scattering in p-type FD/SOI devices”, *Solid State Electronics*, vol. 49, pp. 1454-1460, (2005)

[**Gómez-Campos, 2005c**] Gómez-Campos F. M., Rodríguez-Bolívar S., Jiménez-Tejada J. A., J. E. Carceller, “Hole ionized impurity scattering in warped, non-parabolic and degenerate bands”, *Conferencia de Dispositivos Electrónicos 2005*, Tarragona (2005)

[**Gómez-Campos, 2005d**] Gómez-Campos F. M., Rodríguez-Bolívar S., López-Villanueva J. A., Jiménez-Tejada J. A., Carceller J. E., “A solution of the effective-mass Schrödinger equation in general isotropic and nonparabolic bands for the study fo two-dimensional carrier gases”, *Journal of Applied Physics*, vol. 98, 033717, (2005)

[**Gómez-Campos, 2005e**] Gómez-Campos F. M., Rodríguez-Bolívar S., Jiménez-Tejada J. A., Carceller J. E., “A study of envelope functions in FD-SOI devices for non-parabolic bands”, *Journal of Computational Electronics*, en impression (2005)

[**Gómez-Campos, 2005f**] Gómez-Campos F. M., Rodríguez-Bolívar S., Jiménez-Tejada J. A., Carceller J. E., “A method to select suitable envelope functions in FD-SOI devices”, *15th Workshop on Modelling and Simulation of Electron Devices*, Università di Pisa, Pisa, Italia, (2005)

[**Goodnick, 1985**] Goodnick S. M., Ferry D. K., Wilmsen C. W., Liliental Z., Fathy D., Krivanek O. L., “Surface roughness at the Si(100)-SiO₂ interface”, *Physical Review B*, vol. 32, pp. 8171-8186, (1985)

[**Harrison, 1956**] Harrison W. A., “Scattering of electrons by lattice vibrations in nonpolar crystals”, *Physical Review*, vol. 104, pp. 1281-1290, (1956)

[**Helmholz, 2002**] Helmholz D., Lew Yan Voon L. C., “Warping in the valence band of silicon”, *Physical Review B*, vol. 65, 233204, (2002)

[**Hiroshima, 1986**] Hiroshima T., Lang R., “Effect of conduction-band nonparabolicity on quantized energy levels of a quantum well”, *Applied Physics Letters*, vol. 49, pp. 456-457, (1986)

[**Hu, 1996**] Hu C.-Y., Banerjee S., Sadra K., Streetman B. G., Sivan R., “Quantization effects in inversion layers of PMOSFET's on Si (100) substrates”, vol. 17, pp. 276-278, (1996)

[**Imanaga, 1991**] Imanaga S. Hayafuji Y. “Monte Carlo modeling of electron transport in a Si metal-oxide-semiconductor inversion layer including quantum state and bulk scattering”, *Journal of Applied Physics*, vol. 70, pp. 1522-1530 (1991)

[**Ioffe Institute**] Ioffe Physico-Technical Institute, Electronic archive “New semiconductor materials. Characteristics and properties”, <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/>

[**Jacoboni, 1983**] Jacoboni C., Reggiani L., “The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials”, *Reviews of Modern Physics*, vol. 55, pp. 645-705, (1983)

[**Kane, 1957**] Kane E. O. “Band structure of indium antimonide”, *Journal of Physics and Chemistry in Solids*, vol 1, pp.249-261, (1957).

[**Kittel, 1963**] Kittel C., “Quantum theory of solids”, Wiley, New York (1963).

[**Kosina, 1999**] Kosina H., “A method to reduce small-angle scattering in Monte Carlo device analysis”, *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 46, pp. 1196-1200, (1999).

[**Landoldt-Börnstein, 1982**] Landoldt-Börnstein, “Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology (New Series)”, editado por K.H. Hellwege, “Group III: Crystal and Solid Physics Vol. 17”; “Semiconductors”, editado por O. Madelung, M. Schultz and H. Weiss, subvol. A; “Physics of Group IV Elements and III-V Compounds”, editado por O. Madelung, Springer, Berlín (1982)

[**Lax, 1958**] Lax B., “Experimental investigations of the electronic band structure of solids”, *Reviews of Modern Physics*, 30, pp. 122-155, (1958)

[**Lopez-Villanueva, 1993**] López-Villanueva J. A., Melchor I., Cartujo P., Carceller J. E., “Modified Schrödinger equation including non parabolicity for the study of a two-dimensional electron gas”, *Physical Review B*, vol. 48, pp. 1626-1631, (1993)

[**López-Villanueva, 1994**] López-Villanueva J. A., Gámiz F., Melchor I., Jiménez-Tejada J. A., “Density of states of a two-dimensional electron gas including nonparabolicity”, *Journal of Applied Physics*, vol. 75, pp. 4267-4269, (1994)

[**Low, 2003**] Low T., Hou Y. T., Li M. F., “Improved one-band self-consistent effective mass methods for hole quantization in p-MOSFET”, *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 50, pp. 1284-1289, (2003)

[**Luttinger, 1955a**] J. M. Luttinger, W. Kohn, “Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields”, *Physical Review*, vol. 97, pp. 869-883, (1955)

[**Luttinger, 1955b**] Luttinger J. M., Goodman R. R., “Classical theory of cyclotron resonance for holes in Ge”, *Physical Review*, 100, pp. 673-674, (1955)

[**Madarasz, 1981**] Madarasz F. L., Lang J. E., Hemeger P. M., “Effective masses for nonparabolic bands in p-type silicon”, *Journal of Applied Physics*, vol. 52, pp. 4646-4648, (1981)

[**Madelung, 1991**] Madelung, O. “Semiconductors”, Springer, Berlín (1991)

[**Matulionis, 1975**] Matulionis A. Požela J., Reklaitis A., “Monte Carlo treatment of electron-electron collisions”, *Solid State Communications*, vol. 16, pp. 1133-1137, (1975)

[**Miller, 1984**] Miller R. C., Kleinman D. A., Gossard A. C., “Energy-gap discontinuities and effective masses for GaAs-Al_xGa_{1-x}As quantum wells”, *Physical Review B*, vol. 29, pp. 7085-7087, (1984)

[**Mori, 2004**] Mori N., Takeda H., “Monte Carlo study of two-dimensional hole transport in a GaAs quantum well”, *Semiconductor Science and Technology*, vol. 19, pp. S17-S19, (2004)

[**Nag, 1991**] Nag B. R., “Boundary conditions for tunneling through potential barriers in nonparabolic semiconductors”, *Applied Physics Letters*, vol. 59, pp. 1620-1622 (1991)

[**Nelson, 1987**] Nelson D. F., Miller R. C., Kleinman D. A., “Band nonparabolicity effects in semiconductor quantum wells”, *Physical Review B*, vo. 35, pp. 7770-7773, (1987)

[**Nguyen, 2003**] Nguyen P. H., Hofmann K. R., Paasch G., “Comparative full-band Monte Carlo study of Si and Ge with screened pseudopotential-based phonon scattering rates”, *Journal of Applied Physics*, vol. 94, pp. 375-386, (2003)

[**Ottaviani, 1975**] G. Ottaviani, L. Reggiani, C. Canali, F. Nava, A. Alberigi-Quaranta, “Hole drift velocity in silicon”, *Physical Review B*, vol. 12, pp. 3318-3329, (1975)

[**Persson, 1988**] Persson A, Cohen R. M., “Reformulated Hamiltonian for nonparabolic bands in semiconductor quantum wells”, *Physical Review B*, vol. 38, pp. 5568-5575 (1988)

[**Phillips, 1958**] Phillips J. C., “Energy-band interpolation scheme based on a pseudopotential”, *Physical Review*, vol. 112, pp. 685-695, (1958)

[Pirovano, 2000] Pirovano A., Lacaita A. L., Zandler G., Oberhuber R., “Explaining the dependences of the hole and electron mobilities in Si inversion layers”, IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 47, pp. 718-724, (2000)

[Price, 1981] Price P. J., “Two dimensional transport in semiconductor layers. I. Phonon scattering”, Annals of Physics, vol. 133, pp. 217-239, (1981)

[Prince, 1953] Prince M. B., “Drift mobilities in semiconductors. I. Germanium”, Physical Review, vol. 92, pp. 681-687, (1953)

[Rees, 1969] Rees H. D., “Calculation of distribution functions by exploiting stability of steady state”, Journal of Physics and Chemistry of Solids, vol. 30, pp. 643-&, (1969)

[Reggiani, 1977] Reggiani L., Canali C., Nava F., Ottaviani G., “Hole drift velocity in germanium”, Physical Review B, vol. 16, pp. 2781-2791, (1977)

[Reggiani, 1978] Reggiani L., “Effect of impurity scattering on the hole drift velocity in germanium”, Physical Review B, vol. 17, pp. 2800-2802, (1978)

[Ridley, 1977] Ridley B. K., “Reconciliation of the Conwell-Weisskopf and Brooks-Herring formulae for charged-impurity scattering in semiconductors: Third-body interference”, Journal of Physics C: Solid State Physics, vol. 10, pp. 1589-1593, (1977)

[Rodríguez-Bolívar, 1999] Rodríguez S., López-Villanueva J. A., Melchor I., Carceller J. E., “Hole confinement and energy subbands in a silicon inversion layer using the effective mass theory”, Journal of Applied Physics, vol. 86, pp. 438-444, (1999)

[Rodríguez-Bolívar, 2000] Rodríguez S., López-Villanueva J. A., Cartujo P., Carceller J. E., “Semiempirical closed-form models for the inversion-layer centroid of a p-MOS including quantum effects”, Semiconductor Science and Technology, vol. 15, pp. 85-90, (2000)

[Rodríguez-Bolívar, 2005a] Rodríguez-Bolívar S., Gómez-Campos F. M., Gámiz F., Carceller J. E., “Implications of nonparabolicity, warping, and inelastic phonon scattering on hole transport in pure Si and Ge within the effective mass framework”, Journal of Applied Physics, vol. 97, 013702, (2005)

[Rodríguez-Bolívar, 2005b] Rodríguez-Bolívar S., Gómez-Campos F. M., Carceller J. E., “Simple analytical valence band structure including warping and non-parabolicity to investigate hole transport in Si and Ge”, Semiconductor Science and Technology, vol. 20, pp. 16-22, (2005)

[Roldán, 1997] Roldán J. B., Gámiz F., López-Villanueva J. A., “Simulación mediante el método de Monte Carlo y modelado del transporte electrónico en transistores MOS de canal corto”, Monografías del Departamento de Electrónica nº 41, Granada (1997).

[Sano, 2002] Sano N., Hiroki A., Matsuzawa K., “Device modelling and simulations toward sub-10 nm semiconductor devices”, IEEE Transactions on nanotechnology, vol. 1, pp. 63-71, (2002)

[Slater, 1954] Slater J. C., Koster G. F., “Simplified LCAO Method for the periodic potential problem”, Physical Review, vol. 94, pp. 1498-1524, (1954)

[Sotomayor-Torres, 2004] Sotomayor-Torres C., Zwick A., Poinsothe F., Groenen J., Prunnila M., Ahopelto J., Mlayah A., Paillard V., “Observations of confined acoustic phonons in silicon membranes”, Physica Status Solidi (c), vol. 1, pp. 2609-2612, (2004).

[Stern, 1972] Stern F., “Self-consistent results for *n*-type Si inversion layers”, Physical Review B, vol. 5, pp. 4891-4899, (1972)

[Sze, 1981] Sze S. M., “Physics of semiconductors devices”, Wiley, New York, 2nd edition (1981)

[Vasileska, 2003] Vasileska D., Prasad C., Wieder H. H., Ferry D. K. “Green’s function approach for transport calculation in a $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ modulation-doped heterostructure”, Physica Status Solidi (b), vol. 239, pp. 103-109, (2003)

[Venugopal, 2003] R. Venugopal, Z. Ren, M. S. Lundstrom, “Simulating quantum transport in nanoscale MOSFETs: Ballistic hole transport, subband engineering and boundary conditions”, IEEE Transactions on Nanotechnology, vol. 2, pp. 135-143, (2003)

[Wenckebach, 2002] Wenckebach W. Th., Kinsler P., “An optimized algorithm for ionized impurity scattering in Monte Carlo simulations”, Computer Physics Communications, vol. 143, pp. 136-141, (2002).

[Wiley, 1971] Wiley J. D., “Polar mobility of holes in III-V compound”, Physical Review B, vol. 4, pp. 2485-2493 (1971).

[Wu, 2003] Wu B., Tang T., Nam J., Tsai J. H., “Monte Carlo simulation of symmetric and asymmetric double-gate MOSFETs using Bohm-based quantum corrections”, IEEE Transactions on nanotechnology, vol. 2, pp. 291-294, (2003)

[Yamada, 1985] Yamada S., Taguchi A., Sugimura A., “Nonparabolic subband structure of $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ - InP quantum wells”, Applied Physics Letters, vol. 46, pp. 675-677 (1985)

[Yamakawa, 1996] Yamakawa S., Ueno H., Taniguchi K. Hamaguchi C. Miyatsuji K., Masaki K., Ravaioli U., “Study of interface roughness dependence of electron mobility in Si inversion layers using the Monte Carlo method”, Journal of Applied Physics, vol. 79, pp. 911-916, (1996)

[Yu, 2001] Yu P. Y., Cardona M., “Fundamentals of Semiconductors”, página 75, Ed. Springer, 3ª edición (2001)